

VŠB - Technická univerzita Ostrava
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Katedra aplikované matematiky

Stabilita řešičů soustav obyčejných
diferenciálních rovnic
Stability of integrators of the ordinary
differential equations systems

Zadání diplomové práce

Student: **Bc. Ondřej Markovič**

Studijní program: N2647 Informační a komunikační technologie

Studijní obor: 1103T031 Výpočetní matematika

Téma: **Stabilita řešičů soustav obyčejných diferenciálních rovnic**
Stability of integrators of the ordinary differential equations systems

Jazyk vypracování: čeština

Zásady pro vypracování:

Cílem práce je analýza numerické stability integrátorů používaných zejména ve speciálních Markov chain Monte Carlo algoritmech. Po nastudování příslušných pasáží z odborné literatury a provedení řady heuristických experimentů se student pokusí o formulování vybraných zajímavých hypotéz a jejich následné teoretické zdůvodnění.

Seznam doporučené odborné literatury:

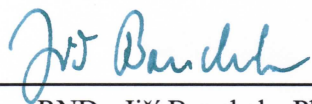
Greguš, Michal, Marko Švec, and Valter Šeda. Obyčejné diferenciálne rovnice. Alfa, 1985.
Hairer, Ernst, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. Vol. 31. Springer Science & Business Media, 2006.

Formální náležitosti a rozsah diplomové práce stanoví pokyny pro vypracování zveřejněné na webových stránkách fakulty.

Vedoucí diplomové práce: **Mgr. Bohumil Krajc, Ph.D.**

Datum zadání: 01.09.2017

Datum odevzdání: 30.04.2018



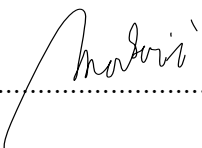
doc. RNDr. Jiří Bouchala, Ph.D.
vedoucí katedry



prof. Ing. Pavel Brandštetter, CSc.
děkan fakulty

„Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně. Uvedl jsem všechny literární prameny a publikace, ze kterých jsem čerpal.“

V Ostravě 30. dubna 2018

.....


Děkuji panu Mgr. Bohumilovi Krajcovi, Ph.D. za pomoc při tvorbě práce.

Abstrakt

Cílem této diplomové práce je vyhodnocení numerických metod k řešení specifického systému obyčejných diferenciálních rovnic. Ne méně důležité je pro nás zkoumání jiného pohledu na klasickou mechaniku, která je popsána hamiltonovským systémem. Tyto autonomní diferenciální rovnice vykazují mnoho zajímavých vlastností, ve smyslu hamiltonovského toku, jako například symplekticita a symetrie. Tyto vlastnosti mohou být také dokázány pro některé numerické řešiče. Leapfrog metoda je zde naším hlavním bodem zájmu. Ukážeme, že tato metoda má mnoho společného s hamiltonovským tokem a aplikujeme ji ve vzorkovací metodě hybridní Monte Carlo. V poslední sekci provádíme různé druhy počítačových simulací.

Klíčová slova: obyčejné diferenciální rovnice, hamiltonovská mechanika, hamiltonovské soustavy, hamiltonovské rovnice, Hamiltonián, hamiltonovský tok, leapfrog, symplekticita, symetrie, reverzibilita, hybridní Monte Carlo

Abstract

The main focus of this master's thesis is to evaluate numerical methods for solving specific systems of ordinary differential equations. No less important to us is to research a different view on classical mechanics, that is described by Hamiltonian system. These autonomous differential equations show many interesting properties, in the sense of Hamiltonian flow, such as symplecticity and time reversal symmetry. These properties can also be proved for some numerical methods. Leapfrog method is the point of interest here. We show, this method has many similarities with Hamiltonian flow and we apply it in sampling method called Hybrid Monte Carlo. In the last section we conduct numerical experiments.

Keywords: ordinary differential equations, Hamiltonian mechanics, Hamiltonian system, Hamiltonian equations, Hamiltonian, Hamiltonian flow, Leapfrog, symplecticity, time-reversal symmetry, reversibility, Hybrid Monte Carlo

OBSAH

Seznam obrázků	7
Seznam tabulek	8
Úvod	9
1. Numerické integrátory	10
1.1. Jednokrokové metody	11
1.2. Lokální a globální chyby	11
1.3. Více o metodách Runge-Kutta	12
1.4. Lokální chyba metody leapfrog	14
1.5. Asymptotická stabilita	15
2. Hamiltonovská mechanika	17
2.1. Hamiltonovský systém	17
3. Symetrie a reverzibilita	19
3.1. Symetrické zobrazení	19
3.2. Reverzibilita	20
4. Symplekticitá a zachování objemu	22
4.1. Symplekticitá	22
4.2. Zachování objemu	23
4.3. Konstrukce symplektických metod	23
4.4. Symplektické metody vyšších řádů	25
5. Hamiltonovské Markov chain Monte Carlo	26
5.1. Hamiltonovské Markov chain Monte Carlo	26
5.2. Kanonické rozdělení	26
5.3. Dva kroky HMC	27
5.4. Stacionarita kanonického rozdělení	29
5.5. Ergodicita HMC	30
5.6. Algoritmus HMC	30
5.7. Aplikace HMC	32
5.8. Konvergence HMC algoritmu	34
6. Aplikace numerických řešičů	36
6.1. Numerické řešení hamiltonovských rovnic experimenty	36
6.2. Ilustrace HMC	40
Závěr	46
Literatura	47
Příloha A	48

SEZNAM OBRÁZKŮ

1.1 Numerická aproximace chování harmonického oscilátoru s časovým posunem Δt . Vlevo užitím explicitní Eulerovy metody (1.2), vpravo užitím metody leapfrog. (1.8)	15
3.1 Reverzibilita: bod z_0 je zobrazen na bod $z(t, z_0)$ levou nebo pravou stranou (3.4)	21
5.1 Schéma MCMC.	26
5.2 Schéma tvorby aktuálního stavu v HMC.	27
5.3 Schéma numerického řešiče v HMC.	28
5.4 Schéma přijetí, zamítnutí vzorku v HMC.	29
5.5 Čtyři iterace HMC, počáteční bod: $[3, -1]$.	32
5.6 Jedna iterace HMC pro zadání (5.3) s počátečními hodnotami $q = [-0.9, -1.1]$: Vlevo trajektorie \mathbf{q} , poloosa vyznačené elipsy má hodnoty směrodatné odchylky. Vpravo jsou znázorněny odpovídající hodnoty Hamiltoniánu v krocích aplikací leapfrogu.	32
5.7 Vzorkování (5.3) na rovině (q_1, q_2) s počáteční hodnotou $[0, 2]$: Vlevo každý 30. vzorek ze 3000 vzorků Metropolis-Hastings. Vpravo 100 vzorků HMC	33
5.8 Vzorkování (5.3), vyobrazen prvek q_1 v kroku n : Vlevo každý 30. vzorek ze 30000 vzorků Metropolis-Hastings. Vpravo 1000 vzorků HMC	33
6.1 Eulerova metoda.	36
6.2 Euler-A metoda.	36
6.3 Metoda leapfrog.	37
6.4 4-stupňová Runge-Kutta metoda.	37
6.5 Symplektická metoda čtvrtého řádu.	37
6.6 Metoda leapfrog, $\Delta t = 0.1$.	38
6.7 Symplektická metoda čtvrtého řádu, $\Delta t = 0.1$.	39
6.8 Metoda leapfrog, $\Delta t = 0.2$.	39
6.9 Symplektická metoda čtvrtého řádu, $\Delta t = 0.2$.	39
6.10 HMC a M-H vzorkování z (6.2), $C = 1$.	41
6.11 HMC a M-H vzorkování z (6.2), $C = 2.5$.	42
6.12 HMC a M-H vzorkování z (6.3).	43

SEZNAM TABULEK

- 1 Pro danou metodu: Maximální naměřená relativní chyba Hamiltoniánu. Na druhém řádku je uvedena doba výpočtu v sekundách. 38

- 2 Pro danou metodu $\Delta t \in \{0.1, 0.2\}$: Maximální naměřená relativní chyba Hamiltoniánu. 40

- 3 Integrál (6.4) na intervalu $\langle 1, 4 \rangle$. Počet vzorků: 50 000 a počáteční vzorek $q_0 = 2$.
Nastavení HMC: $\Delta t = 0.01$, $L =$ (viz. tabulka), $p \sim \mathcal{N}(0, 1)$. Nastavení M-H: $\sigma_{pr}^2 = 1$. 44

- 4 Integrál (6.4) na intervalu $\langle \frac{1}{7}, \frac{4}{7} \rangle$. Počet vzorků: 50 000 a počáteční vzorek $q_0 = \frac{1}{2}$.
Nastavení HMC: $\Delta t = 0.01$, $L =$ (viz. tabulka), $p \sim \mathcal{N}(0, 1)$. Nastavení M-H: $\sigma_{pr}^2 = \frac{1}{100}$. 44

- 5 Integrál (6.4) na intervalu $\langle \frac{1}{49}, \frac{4}{7} \rangle$. Počet vzorků: 50 000 a počáteční vzorek $q_0 = \frac{1}{2}$.
Nastavení HMC: $\Delta t = 0.01$, $L =$ (viz. tabulka), $p \sim \mathcal{N}(0, 2)$. Nastavení M-H: $\sigma_{pr}^2 = 5 \cdot 10^{-3}$. 45

- 6 Integrál (6.5) na intervalu $\langle -3, 4 \rangle$. Počet vzorků: 50 000 a počáteční vzorek $q_0 = \frac{1}{2}$.
Jednotné nastavení HMC: $\Delta t = 0.1$. 45

Úvod

V práci je popisována zejména technika použití symplektických numerických metod v kontextu aplikace metody „Hamiltonian Markov chain Monte Carlo“. Uvedená metoda může sloužit k efektivnímu vzorkování náhodného vektoru se zadanou hustotou. V první části textu jsou popsány dále používané numerické metody, včetně stručného popisu jejich vlastností. Druhá část práce je věnována principu a popisu základních vlastností hamiltonovské mechaniky. Jedná se o (částečně intuitivní) výklad zachování reverzibility, symplekticity a symetrie hamiltonovských soustav a odpovídající vlastnosti vhodných numerických řešičů, zejména metody leapfrog. Následuje popis „hybridní metody Monte Carlo“ spolu se zdůvodněním invariantnosti vzorkovaného rozdělení vzhledem k přechodovému jádru Markovových řetězců. V práci se předpokládá, že čtenář je obeznámen se základními vlastnostmi Markovových řetězců na spojitě množině stavů. Protože hlavním cílem práce je experimentální studium chování numerických řešičů autonomních soustav, je pro ilustraci uveden pouze jeden teoretický výsledek týkající se problematiky konvergence k cílovému rozdělení pravděpodobnosti. Předposlední část práce obsahuje experimenty s různými numerickými řešiči hamiltonovských soustav včetně heuristické analýzy vlivu různých metod na dobu výpočtu a šíření chyby. Poslední část je věnována simulaci některých rozdělení pravděpodobnosti metodami Metropolis-Hastings a Hybrid Monte Carlo.

V řadě míst textu je z důvodu přehlednosti vynechán explicitní popis rozsahu indexů, pokud autor usoudil, že je z kontextu zřejmý. Při tvorbě práce byly použity následující softwarové prostředky: k symbolickým výpočtům byl používán Maple¹ a Wolfram|Alpha², jako vhodné prostředí pro numerické výpočty byl zvolen Matlab³.

¹Maple® je registrovanou ochrannou známkou společnosti Waterloo Maple Inc.

²Wolfram|Alpha® je registrovanou ochrannou známkou společnosti Wolfram Alpha LLC

³Matlab® je registrovanou ochrannou známkou společnosti The MathWorks. Inc.

1. Numerické integrátory

V této kapitole (čerpáme zde především z [1]) uvedeme několik základních numerických metod, integrátorů, k řešení Cauchyových úloh pro autonomní soustavy ve tvaru:

$$\frac{d}{dt}z = f(z), \quad z(t_0) = z^0, \quad \text{kde } f: \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k, \quad t_0 \in \mathbb{R}, \quad z_0 \in \mathbb{R}^k. \quad (1.1)$$

Dále budeme předpokládat, že pro každé $t_0 \in \mathbb{R}$ řešení (1.1) existuje a je dáno jednoznačně na intervalu $\langle t_0, \infty \rangle$. Poznamenejme, že uvažujeme autonomní systém, takže není příliš podstatná volba počátečního času t_0 . Pro libovolné $\tau \in \mathbb{R}$ totiž platí: funkce $w(t) = z(t - \tau)$ je řešením rovnice v (1.1) právě tehdy, když funkce z je řešením této rovnice. Řešení diferenciální rovnice (1.1) označujeme často $z(t)$ nebo z , někdy také pro zdůraznění počáteční podmínky $z(t; t_0; z^0)$ nebo stručněji $z(t; z^0)$. Derivace podle času budeme taky někdy označovat tečkou, tzn. $\dot{z}(t) = \frac{d}{dt}z(t)$. Zápis $z(t; z^0)$ můžeme tak využít ke sdělení, že bod z^0 se pomocí soustavy (1.1) zobrazí na bod $z(t; z^0)$.

Definice 1. Nechť je dán „časový posun“ $t \geq 0$. Tokem přiřazeným diferenciální rovnici v (1.1) nazveme zobrazení $\phi_t: \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$ takové, že

$$\phi_t(\bar{z}) := z(t; \bar{z}),$$

kde \bar{z} je řešení (1.1).

Poznámka. Uvažujme Cauchyovu úlohu

$$\frac{d}{dt}z = f(z), \quad z(\tau) = z^0, \quad \text{kde } f: \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k, \quad \tau \in \mathbb{R}, \quad z_0 \in \mathbb{R}^k.$$

Z předešlých předpokladů a úvah je patrné, že uvedená Cauchyova úloha definuje pro stejnou hodnotu časového posunu stejný tok jako (1.1).

Snadno lze odvodit důležitý vztah pro skládání toků:

$$(\phi_{t_2} \circ \phi_{t_1})(\bar{z}) = \phi_{t_1+t_2}(\bar{z}).$$

Nechť je dán tok ϕ_t pak zobrazením ϕ_{-t} rozumíme inverzi ϕ_t , tedy zobrazení ϕ_t^{-1} .

Rovnoměrnou diskretizací řešení úlohy (1.1) budeme rozumět hodnoty jejího řešení v časech $t_0, t_1 = t_0 + \Delta t, t_2 = t_1 + \Delta t \dots$, tedy $z(t_0), z(t_1) \dots$. Uvedené hodnoty lze stručně zapsat jako posloupnost „mocnin toku“:

$$\{z(t_n)\}_{n=0}^\infty = \{\phi_{\Delta t}^n(z_0)\}_{n=0}^\infty.$$

Přitom pro $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ označuje $\phi_{\Delta t}^n$ n složení toku $\phi_{\Delta t}$. Poznamenejme, že $\phi_{\Delta t}^0$ chápeme jako identické zobrazení. Numerické aproximace skutečných hodnot řešení se stejnou časovou diskretizací a s odpovídající počáteční hodnotou $z^0 = z(t_0)$ pak budeme označovat z^i . Tedy $z^i \approx z(t_i)$, $i \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Nechť zobrazení $\psi_{\Delta t}: \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$ odpovídá příslušnému numerickému řešiči. Například při volbě Eulerovy metody

$$z^{n+1} = z^n + \Delta t f(z^n)$$

platí:

$$\psi_{\Delta t}(z^n) = z^{n+1}.$$

Obdobně jako u toku můžeme s využitím skládání zobrazení psát:

$$z^n = \psi_{\Delta t}^n(z^0).$$

V kontextu numerických metod budeme toto zobrazení někdy nazývat (numerickou) metodou a může být reprezentováno příslušnou transformační maticí.

1.1. Jednokrokové metody. V této práci budeme používat zejména jednokrokové numerické řešiče soustav obyčejných diferenciálních rovnic. Uvažujme diferenciální rovnici (1.1) spolu s diskretizací uvedenou výše. Připomeňme ovšem nejprve, že o dané metodě řekneme, že je explicitní, jestliže lze následující aproximace přímo vypočítat z aproximací minulých. O metodě řekneme, že je implicitní, jestliže hledaná aproximace je také implicitně obsažena v příslušném předpisu. Základní jednokrokové metody lze schématicky popsat následujícími vzorci:

- Explicitní Eulerova metoda

$$z^{n+1} = z^n + \Delta t f(z^n), \quad (1.2)$$

- Implicitní Eulerova metoda

$$z^{n+1} = z^n + \Delta t f(z^{n+1}),$$

- Lichoběžníková metoda

$$z^{n+1} = z^n + \frac{\Delta t}{2} (f(z^n) + f(z^{n+1})),$$

- Implicitní midpoint metoda

$$z^{n+1} = z^n + \Delta t f\left(\frac{z^n + z^{n+1}}{2}\right).$$

Dále budeme často pracovat s explicitní Eulerovou metodou, zejména při porovnávání s metodou leapfrog.

1.2. Lokální a globální chyby. V případě chyb získaných aproximací řešení nás často zajímá chyba získaná jednou iterací numerické metody, tzv. lokální chyba. Chyba globální pak udává odchylku od přesného řešení vzhledem k celému intervalu, na kterém řešení uvažujeme. U chyb získaných zaokrouhlením budeme dále předpokládat, že jsou zanedbatelné.

Lokální chybu lze získat porovnáním aproximace poskytnuté řešičem s Taylorovým rozvojem přesného řešení. Předpokládejme tedy $\bar{z}(\tilde{t}) = z(\tilde{t})$ a zkoumejme hodnotu odchylky aproximace $\bar{z}(\tilde{t} + \Delta t)$ od přesného řešení $z(\tilde{t} + \Delta t)$. Nechť Δt označuje iterační krok. Dále označme lokální chybu aproximace takto: $e_{\tilde{t}+\Delta t} = z(\tilde{t} + \Delta t) - \bar{z}(\tilde{t} + \Delta t)$. V případě explicitní Eulerovy metody bude uvedená chyba nabývat tvaru:

$$\text{přesné řešení: } z(\tilde{t} + \Delta t) = z(\tilde{t}) + \Delta t f(z(\tilde{t})) + \frac{\Delta t^2}{2!} f'(z(\tilde{t})) f(z(\tilde{t})) + \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

$$\text{aproximace: } \bar{z}(\tilde{t} + \Delta t) = \bar{z}(\tilde{t}) + \Delta t f(\bar{z}(\tilde{t})),$$

$$e_{\tilde{t}+\Delta t} = z(\tilde{t} + \Delta t) - \bar{z}(\tilde{t} + \Delta t) = \frac{\Delta t^2}{2!} f'(z(\tilde{t})) f(z(\tilde{t})) + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Uvedený tvar můžeme schématicky zapsat takto:

$$e_{\tilde{t}+\Delta t} = z(\tilde{t} + \Delta t) - \bar{z}(\tilde{t} + \Delta t) = C_2(z(\tilde{t})) \Delta t^2 + C_3(z(\tilde{t})) \Delta t^3 + \dots$$

Podobně můžeme postupovat i u dalších jednokrokových metod, což vede k symbolickému zápisu:

$$e_{\tilde{t}+\Delta t} = \mathbf{z}(\tilde{t} + \Delta t) - \bar{\mathbf{z}}(\tilde{t} + \Delta t) = C_{p+1}(\mathbf{z}(\tilde{t}))\Delta t^{p+1} + C_{p+i}(\mathbf{z}(\tilde{t}))\Delta t^{p+i} + \dots$$

kde $i > 1$, $i \in \mathbb{N}$ a $C_j(\mathbf{z}(\tilde{t}))$, $j \in \mathbb{N}$ budou v nějaké formě obsahovat hodnoty derivace $\mathbf{z}(t)$ vyšších řádů v čase \tilde{t} . Číslo p nazýváme řád metody. Řád jednokrokové metody je tedy takové číslo p , že platí:

$$\mathbf{z}(\tilde{t} + \Delta t) - \bar{\mathbf{z}}(\tilde{t} + \Delta t) = \mathcal{O}(\Delta t^{p+1}), \text{ pro } \Delta t \rightarrow 0.$$

Eulerova metoda je tedy řádu prvního a lze ukázat, že také implicitní Eulerova metoda má stejný řád. Lichoběžníková metoda a implicitní midpoint metoda jsou řádu druhého.

Odhad globální chyby pro N kroků Eulerovy metody lze získat za předpokladu, že f splňuje Lipschitzovskou podmínku na vhodné otevřené množině $D \subset \mathbb{R}^k$ obsahující řešení

$$\|f(u) - f(v)\| \leq L \|u - v\|, \quad \forall u, v \in D, \quad (1.3)$$

kde L je kladná konstanta. Potom z Věty 1 [str. 17, [1]], za podmínky (1.3) a za předpokladu, že je řešení dvakrát spojitě diferencovatelné, plyne exponenciální odhad globální chyby Eulerovy metody ve tvaru:

$$\|\mathbf{z}(t_n) - \mathbf{z}^n\| \leq K(e^{t_n L} - 1)\Delta t, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

kde K je nezávislé na integračním intervalu $N \cdot \Delta t$ a Δt je délka kroku.

1.3. Více o metodách Runge-Kutta. Všechny metody uvedené výše patří do skupiny tzv. Runge-Kutta metod. Ty lze pro diferenciální rovnici (1.1) zapsat pomocí schématu:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^{n+1} &= \mathbf{z}^n + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i f(\mathbf{Z}_i), \\ \mathbf{Z}_i &= \mathbf{z}^n + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} f(\mathbf{Z}_j), \end{aligned}$$

kde $\{b_i\}$ a $\{a_{ij}\}$ jsou vhodné konstanty. O metodě pak hovoříme jako o s -stupňové Runge-Kutta metodě. Uvedme příklad 4-stupňové Runge-Kutta metody o níž lze dokázat, že je čtvrtého řádu:

$$\mathbf{z}^{n+1} = \mathbf{z}^n + \frac{1}{6}\Delta t(f(\mathbf{Z}_1) + 2f(\mathbf{Z}_2) + 2f(\mathbf{Z}_3) + f(\mathbf{Z}_4)), \text{ kde}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_1 &= \mathbf{z}^n, & \mathbf{Z}_2 &= \mathbf{z}^n + \frac{1}{2}\Delta t f(\mathbf{Z}_1), \\ \mathbf{Z}_3 &= \mathbf{z}^n + \frac{1}{2}\Delta t f(\mathbf{Z}_2), & \mathbf{Z}_4 &= \mathbf{z}^n + \Delta t f(\mathbf{Z}_3). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Runge-Kutta metody mohou být obohaceny o využití různého přístupu k řešení různých komponent soustavy diferenciálních rovnic. Tato zobecnění nazýváme dělené Runge-Kutta metody. Například pro soustavu

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = g(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad \frac{d}{dt}\mathbf{y} = h(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

mohou mít tento tvar:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{n+1} &= \mathbf{x}^n + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i g(\mathbf{X}_i, \mathbf{Y}_i), \\ \mathbf{y}^{n+1} &= \mathbf{y}^n + \Delta t \sum_{i=1}^s \tilde{b}_i h(\mathbf{X}_i, \mathbf{Y}_i), \\ \mathbf{X}_i &= \mathbf{x}^n + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} g(\mathbf{X}_j, \mathbf{Y}_j), \\ \mathbf{Y}_i &= \mathbf{y}^n + \Delta t \sum_{j=1}^s \tilde{a}_{ij} h(\mathbf{X}_j, \mathbf{Y}_j).\end{aligned}$$

Uvedenou formu lze výhodně použít například k efektivnímu řešení následujících soustav vycházejících z Newtonova zákona síly:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \mathbf{q} &= \mathbf{v}, \\ \mathbf{M} \frac{d}{dt} \mathbf{v} &= -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}),\end{aligned}\tag{1.5}$$

kde $V(\mathbf{q})$ označuje potenciální energii a $\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})$ označuje příslušný gradient. Dále se v textu budeme věnovat zejména následujícím metodám:

- Euler-A metoda

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \Delta t \mathbf{v}^n, \\ \mathbf{v}^{n+1} &= \mathbf{v}^n - \Delta t \mathbf{M}^{-1} \left(\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^{n+1}) \right),\end{aligned}\tag{1.6}$$

- Euler-B metoda

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \Delta t \mathbf{v}^{n+1}, \\ \mathbf{v}^{n+1} &= \mathbf{v}^n - \Delta t \mathbf{M}^{-1} \left(\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^n) \right),\end{aligned}\tag{1.7}$$

- Leapfrog

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \Delta t \mathbf{v}^n - \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathbf{M}^{-1} \left(\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^n) \right), \\ \mathbf{v}^{n+1} &= \mathbf{v}^n - \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{M}^{-1} \left(\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^n) + \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^{n+1}) \right).\end{aligned}\tag{1.8}$$

Leapfrog metoda může být ekvivalentně zapsána jako tzv. Störmer-Verlet metoda:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{v}^n - \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{M}^{-1} \left(\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^n) \right), \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \Delta t \mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{v}^{n+1} &= \mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{M}^{-1} \left(\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^{n+1}) \right).\end{aligned}$$

Všechny zde uvedené metody jsou explicitní, Euler-A a Euler-B jsou řádu prvního a leapfrog řádu druhého. Odhadem globální chyby se zabývají například v [4]. Uveďme zde pro zajímavost odvození odhadu lokální chyby pro metodu leapfrog.

1.4. Lokální chyba metody leapfrog. Označme tedy aproximaci řešení v čase t takto: $\bar{z} = (\bar{q}, \bar{v})$. Délku kroku jedné iterace metody označme Δt . Nechť $z(\tilde{t}) = \bar{z}(\tilde{t})$, kde z je přesným řešením (1.5). Vyjděme ze vztahů:

$$\begin{aligned} e_{\tilde{t}+\Delta t} &= z(\tilde{t} + \Delta t) - \bar{z}(\tilde{t} + \Delta t), \\ \dot{q}(\tilde{t}) &= v(\tilde{t}), \\ \dot{v}(\tilde{t}) &= -M^{-1}(\nabla_q V(q(\tilde{t}))). \end{aligned}$$

Odtud postupně plyne:

$$\begin{aligned} q(\tilde{t} + \Delta t) &= q(\tilde{t}) + \Delta t \dot{q}(\tilde{t}) + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{q}(\tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \\ \bar{q}(\tilde{t} + \Delta t) &= \bar{q}(\tilde{t}) + \Delta t \bar{v}(\tilde{t}) - \frac{\Delta t^2}{2} M^{-1}(\nabla_q V(\bar{q}(\tilde{t}))), \\ e_{\tilde{t}+\Delta t}^{(q)} &= q(\tilde{t} + \Delta t) - \bar{q}(\tilde{t} + \Delta t) = \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned}$$

Pro odvození lokální chyby druhé komponenty (rychlosti) odečteme dva vhodně zvolené Taylo-rovy polynomy pro v . Po drobné úpravě tak získáváme:

$$\begin{aligned} v(\tilde{t} + \Delta t) &= v(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{\Delta t}{2} \dot{v}(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \ddot{v}(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \\ v(\tilde{t}) &= v(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) - \frac{\Delta t}{2} \dot{v}(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \ddot{v}(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \\ v(\tilde{t} + \Delta t) &= v(\tilde{t}) + \Delta t \dot{v}(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \tag{1.9}$$

Analogicky budeme postupovat pro $a = \dot{v}(\tilde{t})$:

$$\begin{aligned} a(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) &= a(\tilde{t}) + \frac{\Delta t}{2} \dot{a}(\tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta t^2), \\ \frac{a(\tilde{t} + \Delta t)}{2} &= \frac{a(\tilde{t}) + \Delta t \dot{a}(\tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta t^2)}{2}, \\ a(\tilde{t} + \frac{\Delta t}{2}) &= \frac{a(\tilde{t}) + a(\tilde{t} + \Delta t)}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \tag{1.10}$$

Nyní dosadíme (1.10) do (1.9):

$$\begin{aligned} v(\tilde{t} + \Delta t) &= v(\tilde{t}) + \Delta t \left(\frac{a(\tilde{t}) + a(\tilde{t} + \Delta t)}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \\ v(\tilde{t} + \Delta t) &= v(\tilde{t}) + \frac{\Delta t}{2} (a(\tilde{t}) + a(\tilde{t} + \Delta t)) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \tag{1.11}$$

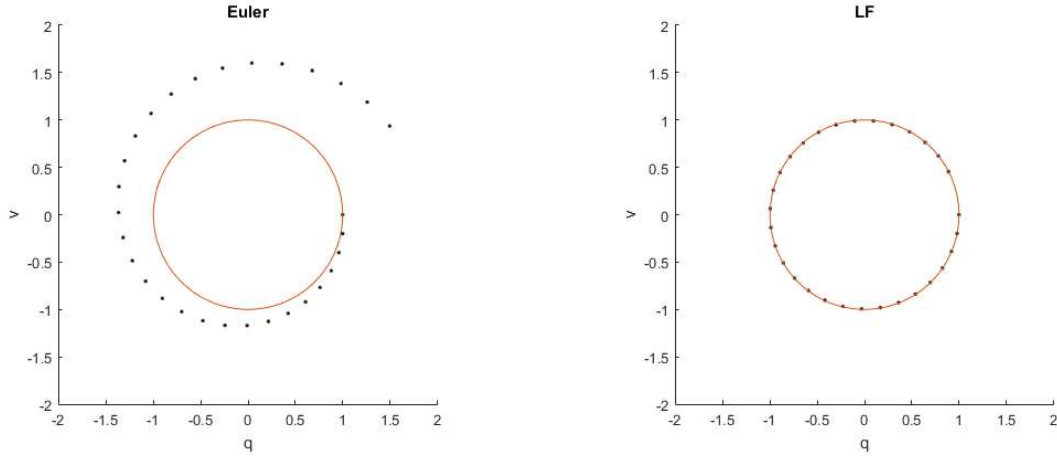
Připomeňme výpočet druhé komponenty metodou leapfrog:

$$\bar{v}(\tilde{t} + \Delta t) = \bar{v}(\tilde{t}) - \frac{1}{2} \Delta t M^{-1}(\nabla_q V(\bar{q}(\tilde{t})) + \nabla_q V(\bar{q}(\tilde{t} + \Delta t))).$$

Nakonec pro lokální chybu rychlosti dostaneme:

$$e_{\tilde{t}+\Delta t}^{(v)} = v(\tilde{t} + \Delta t) - \bar{v}(\tilde{t} + \Delta t) = \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Ověřili jsme, že metoda leapfrog je druhého řádu.



OBRÁZEK 1.1. Numerická aproximace chování harmonického oscilátoru s časovým posunem Δt . Vlevo užitím explicitní Eulerovy metody (1.2), vpravo užitím metody leapfrog. (1.8)

1.5. Asymptotická stabilita. Pomocí řešičů R1, R2 (viz. příloha) jsou na obrázku 1.1 znázorněny aproximace řešení harmonického oscilátoru

$$\begin{aligned}\dot{q} &= v, \\ \dot{v} &= -\omega^2 q,\end{aligned}\tag{1.12}$$

s volbou $\omega^2 = 1$. Za počáteční hodnotu v čase $t_0 = 0$ byl zvolen bod $[1, 0]$. Odpovídající trajektorii přesného řešení harmonického oscilátoru bude zřejmě jednotková kružnice v rovině (q, v) . Na obrázku 1.1. vidíme, že numerická aproximace užitím Eulerovy metody se od řešení spirálovitě vzdaluje - uvedená aproximace vykazuje neomezený růst. Naopak u numerické aproximace metodou leapfrog se zdá, že leží těsně u jednotkové kružnice. Odlišné chování obou metod vede autory v [1] k zavedení pojmu asymptotická stabilita.

Eulerova metoda na (1.12) vede k zápisu

$$\begin{bmatrix} q^{n+1} \\ v^{n+1} \end{bmatrix} = \psi_{\Delta t} \begin{bmatrix} q^n \\ v^n \end{bmatrix},$$

s transformační maticí

$$\psi_{\Delta t} = \begin{bmatrix} 1 & \Delta t \\ -\Delta t \omega^2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Ta má vlastní čísla

$$\lambda_{1,2} = 1 \pm i\Delta t \omega \text{ s modulem } \sqrt{1 + (\Delta t \omega)^2} > 1.$$

Ukazuje se, že chování aproximací v obrázku 1.1. lze charakterizovat mocninami vlastních čísel transformační matice (viz. str. 27 [1]). Řekneme, že numerická metoda reprezentovaná transformační maticí $\psi_{\Delta t}$ je asymptoticky stabilní, jestliže růst řešení lineárního modelu je asymptoticky omezený. Postačující podmínkou pro asymptotickou stabilitu je poloha všech vlastních čísel matice $\psi_{\Delta t}$ v jednotkovém kruhu v komplexní rovině, přičemž požadujeme, aby všechna vlastní čísla ležící na jednotkové kružnici byla jednoduchá. Jelikož vlastní čísla transformační matice Eulerovy metody leží mimo jednotkový kruh v komplexní rovině ($\Delta t > 0$), je Eulerova metoda v tomto příkladě asymptoticky nestabilní.

Leapfrog metodě odpovídá transformační matice ve tvaru:

$$\hat{\psi}_{\Delta t} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{(\Delta t\omega)^2}{2} & \Delta t \\ -\Delta t\omega^2(1 - \frac{(\Delta t\omega)^2}{4}) & 1 - \frac{(\Delta t\omega)^2}{2} \end{bmatrix}.$$

Vlastní čísla této matice:

$$\hat{\lambda}_{1,2} = 1 - \frac{1}{2}(\Delta t\omega)^2 \pm \sqrt{\left(\frac{1}{4}(\Delta t\omega)^4 - (\Delta t\omega)^2\right)}.$$

Pro $(\Delta t\omega)^2 > 4$ jsou obě vlastní čísla reálná a jedno z nich je v absolutní hodnotě vždy větší než jedna. V případě $(\Delta t\omega)^2 = 4$ se jedná o dvojnásobné vlastní číslo na jednotkové kružnici. Pro $(\Delta t\omega)^2 < 4$ získáváme komplexně sdruženou dvojici vlastních čísel násobnosti 1, přičemž:

$$\left|\hat{\lambda}_{1,2}\right|^2 = \left(1 - \frac{1}{2}(\Delta t\omega)^2\right)^2 - \frac{1}{4}(\Delta t\omega)^4 + (\Delta t\omega)^2 = 1,$$

tzn. vlastní čísla leží na jednotkové kružnici. V případě (1.12) je proto metoda leapfrog asymptoticky stabilní pro $(\Delta t\omega)^2 < 4$.

Případ (1.12) lze zobecnit na $2 \times d$ – dimenzionální problém

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}} = -\mathbf{K}\mathbf{q},$$

kde \mathbf{K} je symetrická, konstantní a pozitivně definitní $d \times d$ matice. V tomto případě je podmínka asymptotické stability zajištěna (viz. str. 30, [1]) v případě $\Delta t^2 \lambda_i < 4$, pro každé vlastní číslo λ_i matice \mathbf{K} .

2. Hamiltonovská mechanika

Hamiltonovská mechanika představuje alternativní pohled na klasickou mechaniku. Základním objektem je zde d -dimenzionální vektor pozice \mathbf{q} , vektor hybnosti pak označujeme \mathbf{p} . Hamiltonovská mechanika může být vyjádřena hamiltonovským systémem nebo celkovou energií. Stejně jako v předchozí kapitole budeme vycházet především z práce [1].

2.1. Hamiltonovský systém. Hamiltonovský systém lze odvodit z Newtonova zákona síly, který lze zapsat ve tvaru:

$$\frac{d}{dt}q_i = v_i, \quad (2.1)$$

$$m_i \frac{d}{dt}v_i = F_i, \quad (2.2)$$

pro $i = 1, \dots, d$. V hamiltonovské mechanice předpokládáme, že sílu F je možné zapsat jako záporný gradient potenciální energie $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, vzhledem k pozici:

$$F(\mathbf{q}) = -\nabla_{\mathbf{q}}V(\mathbf{q}).$$

Zavedme hybnost \mathbf{p} vztahem

$$\mathbf{p} := \mathbf{M}\mathbf{v} = (m_1\mathbf{v}, \dots, m_d\mathbf{v}),$$

kde \mathbf{M} je symetrická, pozitivně definitní matice hmotností (\mathbf{M} bývá často diagonální a někdy dokonce jen skalární násobek jednotkové matice I). Dosazením do (2.1), (2.2) získáváme základní formu hamiltonovského systému pro klasickou mechaniku, neboli hamiltonovské rovnice pohybu:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{q} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{p}, \quad (2.3)$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p} = -\nabla_{\mathbf{q}}V(\mathbf{q}). \quad (2.4)$$

K rovnicím (2.3) a (2.4) lze přiřadit celkovou energii danou tzv. hamiltonovskou funkcí (Hamiltoniánem) $H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$,

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}}{2} + V(\mathbf{q}).$$

Uvedený postup lze zobecnit, zavedeme-li (zobecněný) Hamiltonián vztahem

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) := T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}),$$

kde $T(\mathbf{p})$ označuje „kinetickou energii“, pak můžeme hamiltonovské rovnice psát ve tvaru:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{q} = \nabla_{\mathbf{p}}H(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \quad (2.5)$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p} = -\nabla_{\mathbf{q}}H(\mathbf{q}, \mathbf{p}). \quad (2.6)$$

Není těžké ukázat, že trajektorie řešení soustavy (2.5), (2.6) leží na hladinách Hamiltoniánu. To odpovídá popisu systémů, ve kterých je zachována celková energie:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) &= \sum_{i=1}^d \left(\nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \frac{d}{dt} \mathbf{q} + \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \frac{d}{dt} \mathbf{p} \right) = \\ &= \sum_{i=1}^d \left(\nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \right) = 0.\end{aligned}$$

Někdy se volně říká, že Hamiltonián je v čase neměnný.

Můžeme také využít maticového zápisu hamiltonovských rovnic. Pro $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{2d}$

$$\mathbf{z} := (\mathbf{q}, \mathbf{p})^T$$

a tzv. kanonickou matici

$$\mathbf{J} := \begin{bmatrix} 0_{d \times d} & I_{d \times d} \\ -I_{d \times d} & 0_{d \times d} \end{bmatrix}, \quad (2.7)$$

kde $I_{d \times d}$ je jednotková matice typu $d \times d$ a $0_{d \times d}$ je nulová matice stejného typu, získáváme hamiltonovský systém ve tvaru

$$\frac{d}{dt} \mathbf{z} = \mathbf{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}). \quad (2.8)$$

Ve speciálním případě může Hamiltonián nabývat tvaru

$$H(\mathbf{z}) = \frac{1}{2} \mathbf{z}^T \mathbf{L} \mathbf{z},$$

kde $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ je symetrická matice. V případě harmonického oscilátoru s $\mathbf{M} = I_{d \times d}$ je

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \omega^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

3. Symetrie a reverzibilita

Řešení hamiltonovských systémů mají celou řadu zajímavých vlastností. Některé z těchto vlastností zůstávají zachovány i pro aproximace přesných řešení, které získáme použitím vhodných numerických metod. V následující části stručně připomeneme tyto vlastnosti a vhodné numerické řešiče.

3.1. Symetrické zobrazení. Necht $\psi_{\Delta t}$ je zobrazení odpovídající kterémukoliv z výše popsaných numerických řešičů. Označme symbolem $\psi_{-\Delta t}$ zobrazení, které dostaneme, když v příslušném předpisu pro $\psi_{\Delta t}$ nahradíme Δt hodnotou $-\Delta t$. Uvažujme hamiltonovskou soustavu (2.8). Zobrazení $\psi_{\Delta t}^*$ definované předpisem

$$\psi_{\Delta t}^* := [\psi_{-\Delta t}]^{-1},$$

nazveme adjungovaným zobrazením k $\psi_{\Delta t}$. Pro adjungované zobrazení tedy platí ekvivalence

$$\psi_{-\Delta t}(z) = \bar{z},$$

právě tehdy když

$$\psi_{\Delta t}^*(\bar{z}) = z.$$

Z definice vyplývá, že adjungované zobrazení k adjungovanému zobrazení je původním zobrazením. Jinak zapsáno, platí:

$$\psi_{\Delta t} = \psi_{\Delta t}^{**}.$$

Zobrazení nazveme symetrické, jestliže

$$\psi_{\Delta t} = \psi_{\Delta t}^*,$$

tzn.

$$\psi_{-\Delta t} = [\psi_{\Delta t}]^{-1}.$$

Na tomto místě zdůrazníme, že lze dokázat (viz. Theorem 1, str. 86, [1]), že řád symetrických metod je vždy sudý.

Příklad. Upravíme-li Euler-A metodu, (1.6) vzhledem k Hamiltoniánu $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$, získáme tvar

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \Delta t \nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}^n), \\ \mathbf{p}^{n+1} &= \mathbf{p}^n - \Delta t \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^{n+1}).\end{aligned}$$

Adjungovanou metodu získáme negací⁴ diskretizačního kroku a následnou inverzí, čili záměnou $(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1})$ za $(\mathbf{q}^n, \mathbf{p}^n)$:

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^n &= \mathbf{q}^{n+1} - \Delta t \nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}^{n+1}) \\ \mathbf{p}^n &= \mathbf{p}^{n+1} + \Delta t \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}^n).\end{aligned}$$

⁴Negací rozumíme všude v tomto textu přenásobení číslem -1 .

Po přerovnání získáme

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \Delta t \nabla_p T(\mathbf{p}^{n+1}) \\ \mathbf{p}^{n+1} &= \mathbf{p}^n - \Delta t \nabla_q V(\mathbf{q}^n),\end{aligned}$$

což je Euler-B metoda (1.7) pro daný Hamiltonián. Tedy metoda Euler-A a v důsledku rovněž metoda Euler-B nejsou symetrické.

Příklad. Pro přehlednost uveďme modifikaci dříve uvedené metody leapfrog (viz. (1.8)) pro soustavu s Hamiltoniánem $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$:

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}^n + \Delta t \nabla_p T(\mathbf{p}^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^n)), \\ \mathbf{p}^{n+1} &= \mathbf{p}^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^n) - \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^{n+1}).\end{aligned}\tag{3.1}$$

Protože leapfrog představuje stěžejní metodu této práce, ukažme jak vypadá příslušná adjungovaná metoda. Provedeme-li negaci diskretizačního kroku a následnou inverzi, získáváme:

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^n &= \mathbf{q}^{n+1} - \Delta t \nabla_p T(\mathbf{p}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^{n+1})), \\ \mathbf{p}^n &= \mathbf{p}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^n).\end{aligned}$$

Po přerovnání získáme vztahy:

$$\mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + \Delta t \nabla_p T(\mathbf{p}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^{n+1})),\tag{3.2}$$

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^{n+1}) - \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(\mathbf{q}^n).\tag{3.3}$$

Nyní dosadíme za \mathbf{p}^{n+1} v (3.2) pravou stranu z (3.3). Výše provedené dosazení je ekvivalentní a získáváme tak leapfrog metodu. Tato metoda je tudíž symetrická.

3.2. Reverzibilita. Zobrazení ,v kontextu toku a numerických metod, **reverzibilní** vzhledem k diferenciální rovnici

$$\frac{d}{dt} \mathbf{z} = f(\mathbf{z}),$$

jestliže pro

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} I_{d \times d} & 0_{d \times d} \\ 0_{d \times d} & -I_{d \times d} \end{bmatrix},$$

platí

$$\psi(\mathbf{z}) = \mathbf{S} \psi^{-1}(\mathbf{S} \mathbf{z}).\tag{3.4}$$

Je zřejmé, že za předpokladu, že metoda splňuje podmínku

$$\psi_{\Delta t}(\mathbf{z}) = \mathbf{S} \psi_{-\Delta t}(\mathbf{S} \mathbf{z}),\tag{3.5}$$

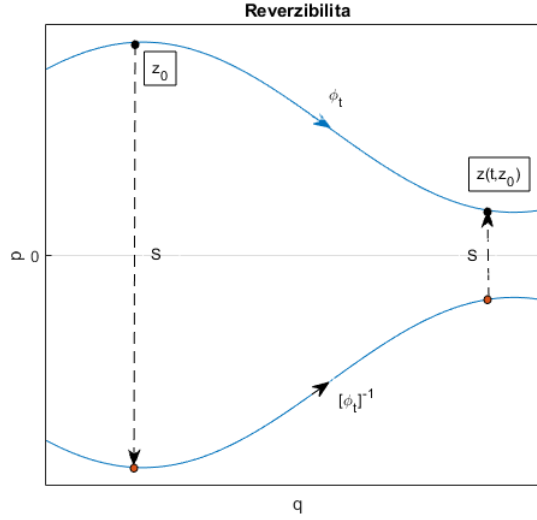
je metoda reverzibilní právě tehdy, když je symetrická.

Obecně, když je Hamiltonián sudá funkce v \mathbf{p} , například vychází-li z Newtonových pohybových rovnic, pak příslušný tok je reverzibilní. To znamená, jestliže je $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ řešením (2.5), (2.6),

potom i $(\hat{q}(t), \hat{p}(t)) := (q(-t), -p(-t))$ je řešením. To lze vyvodit z následujících rovností

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{q} &= -\nabla_p H(q(-t), p(-t)) = +\nabla_p H(\hat{q}(t), \hat{p}(t)), \\ \frac{d}{dt}\hat{p} &= -\nabla_q H(q(-t), p(-t)) = -\nabla_q H(\hat{q}(t), \hat{p}(t)).\end{aligned}$$

Na grafu je pak reverzibilita hamiltonovské mechaniky viditelná jako symetrie řešení podle hybnosti $p = 0$.



OBRÁZEK 3.1. Reverzibilita: bod z_0 je zobrazen na bod $z(t, z_0)$ levou nebo pravou stranou (3.4)

Reverzibilita hamiltonovské mechaniky je dána i Hamiltoniánem, tzn. pro příslušný hamiltonovský tok $\phi_{t,H}$ platí

$$\begin{aligned}H(z) &= H(Sz), \quad z = (q, p)^T \\ \phi_{t,H}(z) &= S[\phi_{t,H}]^{-1}(Sz).\end{aligned}$$

Příklad. Leapfrog metoda je reverzibilní, tzn. platí:

$$S^{-1}\psi_{\Delta t}\left(\begin{bmatrix} q^n \\ p^n \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \bar{q}^{n+1} \\ \bar{p}^{n+1} \end{bmatrix},$$

kde z (3.4) a (3.5) plyne

$$\begin{bmatrix} \bar{q}^{n+1} \\ \bar{p}^{n+1} \end{bmatrix} = \psi_{-\Delta t}\left(S\begin{bmatrix} q^n \\ p^n \end{bmatrix}\right),$$

negací časového toku a aplikace S získáme

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} \bar{q}^{n+1} \\ \bar{p}^{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} q^n - \Delta t \nabla_p T(-p^n + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(q^n)) \\ -p^n + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(q^n) + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(q^{n+1}) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} q^n + \Delta t \nabla_p T(p^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(q^n)) \\ -p^n + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(q^n) + \frac{\Delta t}{2} \nabla_q V(q^{n+1}) \end{bmatrix} = S^{-1}\psi_{\Delta t}\left(\begin{bmatrix} q^n \\ p^n \end{bmatrix}\right).\end{aligned}$$

4. Symplekticita a zachování objemu

4.1. **Symplekticita.** Podobně jako při maticovém zápisu hamiltonovského systému uvažujeme kanonickou matici:

$$\mathbf{J} := \begin{bmatrix} 0_{d \times d} & I_{d \times d} \\ -I_{d \times d} & 0_{d \times d} \end{bmatrix}.$$

Na tomto místě si vystačíme s poněkud speciálním případem definice symplekticity. Řekneme, že hladké zobrazení $\psi : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ je symplektické zobrazení, (vzhledem k \mathbf{J}), jestliže pro Jakobiho matici $\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z})$ platí

$$\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}) \right]^T \mathbf{J}^{-1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}) = \mathbf{J}^{-1}, \quad \forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^{2d}. \quad (4.1)$$

Dokažme, že hladký tok $\phi_{t,H}$ hamiltonovského systému (2.8) je symplektický. Nejprve запиšme:

$$\mathbf{F}(t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \phi_{t,H}(\mathbf{z}).$$

Chceme dokázat:

$$\mathbf{F}^T(t) \mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}(t) = \mathbf{J}^{-1}.$$

Jelikož

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \phi_{0,H}(\mathbf{z}) = I_{2d \times 2d},$$

tak pro $t = 0$ je podmínka elementárně splněna. Pro $t > 0$ použijeme následující úvahu. Označme

$$K(t) = \mathbf{F}^T(t) \mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}(t).$$

Pokud dokážeme, že platí:

$$\frac{d}{dt} K(t) = 0,$$

pak $K(t)$ je konstantní a protože $\lim_{t \rightarrow 0+} K(t) = K(0)$, nutně $K(t) = \mathbf{J}^{-1}$.

Pro níže uvedené výpočty se nám bude hodit zavést označení \mathbf{H} pro Hessovu matici druhých parciálních derivací, tzn: $\mathbf{H} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \nabla_z$. Nejdříve budeme derivovat s využitím (2.8):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{F}(\hat{\mathbf{z}}) &= \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \phi_{t,H}(\hat{\mathbf{z}}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{z}(t) = \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{J} \nabla_z H(\mathbf{z}(t)) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{J} \nabla_z H(\phi_{t,H}(\hat{\mathbf{z}})) = \\ &= \mathbf{J} \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \nabla_z H(\phi_{t,H}(\hat{\mathbf{z}})) = \mathbf{J} \mathbf{H}(\mathbf{z}(t)) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \phi_{t,H}(\hat{\mathbf{z}}) = \\ &= \mathbf{J} \mathbf{H}(\mathbf{z}(t)) \cdot \mathbf{F}(\hat{\mathbf{z}}). \end{aligned}$$

Odtud plyne:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} K &= \mathbf{F}^T \mathbf{J}^{-1} \frac{d}{dt} \mathbf{F} + \left[\frac{d}{dt} \mathbf{F} \right]^T \mathbf{J}^{-1} \mathbf{F} \\ &= \mathbf{F}^T \mathbf{J}^{-1} \mathbf{J} \mathbf{H}(\mathbf{z}(t)) \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \mathbf{H}^T(\mathbf{z}(t)) \mathbf{J}^T \mathbf{J}^{-1} \mathbf{F} \\ &= \mathbf{F}^T \mathbf{H}(\mathbf{z}(t)) \mathbf{F} - \mathbf{F}^T \mathbf{H}(\mathbf{z}(t)) \mathbf{F} \\ &= 0, \end{aligned}$$

což jsme chtěli dokázat.

4.2. Zachování objemu. Ukážeme nyní, že objem je invariantní vůči symplektickým zobrazením, tedy i toku hamiltonovského systému⁵ (2.8). Podle věty o substituci o vícerozměrných integrálech je změna objemu při transformaci vyjádřena integrálem z absolutní hodnoty Jakobiánu⁶. Stačí tedy ukázat, že absolutní hodnota Jakobiánu je rovna jedné. Nechť ψ je symplektické zobrazení. Pak platí:

$$\begin{aligned}\det \left(\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}) \right]^T \mathbf{J}^{-1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}) \right) &= \det \mathbf{J}^{-1}, \\ \det \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}) \right]^T \det \mathbf{J}^{-1} \det \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}) &= \det \mathbf{J}^{-1}, \\ \left(\det \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}) \right)^2 &= 1, \\ \left| \det \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}) \right| &= 1.\end{aligned}$$

4.3. Konstrukce symplektických metod. Není těžké si uvědomit, že složením dvou symplektických zobrazení získáváme opět symplektické zobrazení. Toto samozřejmě platí rovněž pro složení toků generovaných hamiltonovskými systémy. Konstrukce numerických symplektických metod lze provést tzv. hamiltonovskými děleními. Celý postup nejprve ilustrujme na konkrétním příkladu.

Příklad. Předpokládejme, že cílový Hamiltonián je tvořen součtem dvou speciálních Hamiltoniánů:

$$H = H_1 + H_2, \quad H_1(q, p) = \frac{p^2}{2}, \quad H_2(q, p) = \frac{q^2}{2}$$

Pohybové rovnice příslušné H_1 , resp. H_2 :

$$\dot{q} = p, \quad \dot{p} = 0,$$

$$\dot{q} = 0, \quad \dot{p} = -q.$$

Toky náležící Hamiltoniánům H_1 a H_2 lze zapsat ve tvaru:

$$\begin{aligned}\phi_{\Delta t, H_1} \left(\begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} \right) &= \begin{bmatrix} q + \Delta t p \\ p \end{bmatrix}, \\ \phi_{\Delta t, H_2} \left(\begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} \right) &= \begin{bmatrix} q \\ p - \Delta t q \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

Uvažujme nyní složení toků

$$\psi_{\Delta t} := \phi_{\Delta t, H_2} \circ \phi_{\Delta t, H_1}.$$

Složení daných toků nabývá formy

$$\psi_{\Delta t} \left(\begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} q + \Delta t p \\ p - \Delta t (q + \Delta t p) \end{bmatrix}.$$

Odtud již snadno získáme příslušný rekurentní předpis

$$\begin{bmatrix} q^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q^n + \Delta t p^n \\ p^n - \Delta t q^{n+1} \end{bmatrix},$$

který odpovídá již známé Euler-A metodě. Tato metoda je tudíž symplektická

⁵Zachování objemu lze také alternativně dokázat z Liouvilleovy věty.

⁶Příslušný výklad lze nalézt například v [1], str. 55-61.

Nyní postupujme poněkud obecněji:

$$H(\mathbf{z}) = H_1(\mathbf{z}) + H_2(\mathbf{z}).$$

Nechť každému sčítanci náleží hamiltonovský systém

$$\frac{d}{dt}\mathbf{z} = \mathbf{J}\nabla_z H_i(\mathbf{z}), \quad i \in \{1, 2\}.$$

Nechť $\phi_{\Delta t, H_1}$, $\phi_{\Delta t, H_2}$ reprezentují toky definované Hamiltoniány H_1 , H_2 . Pro naše další úvahy bude stěžejní následující kompozice uvedených toků:

$$\psi_{\Delta t} := \phi_{\Delta t, H_2} \circ \phi_{\Delta t, H_1}.$$

Metodu, kterou budeme považovat za numerický řešič soustavy s Hamiltoniánem $H_1 + H_2$, získáme jako zobrazení $\psi_{\Delta t}$ (obecně aproximaci tohoto zobrazení⁷). Takto definovaný řešič bude rovněž symplektický. Aby navržený řešič byl rozumný, potřebujeme ještě dokázat, že je alespoň prvního řádu. Nejprve provedme Taylorovy rozvoje toků:

$$\begin{aligned} \phi_{\Delta t, H_i}(\mathbf{z}^0) &= \mathbf{z}^0 + \Delta t \dot{\mathbf{z}}(t_0) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= \mathbf{z}^0 + \Delta t \mathbf{J} \nabla H_i(\mathbf{z}^0) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Nyní můžeme psát:

$$\begin{aligned} \psi_{\Delta t}(\mathbf{z}^0) &= \phi_{\Delta t, H_2}(\phi_{\Delta t, H_1}(\mathbf{z}^0)) \\ &= \phi_{\Delta t, H_1}(\mathbf{z}^0) + \Delta t \mathbf{J} \nabla H_2(\phi_{\Delta t, H_1}(\mathbf{z}^0)) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= \mathbf{z}^0 + \Delta t \mathbf{J} \nabla H_1(\mathbf{z}^0) + \Delta t \mathbf{J} \nabla H_2(\mathbf{z}^0) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= \mathbf{z}^0 + \Delta t \mathbf{J} \nabla H(\mathbf{z}^0) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= \phi_{\Delta t, H}(\mathbf{z}^0) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Platí tedy $\psi_{\Delta t}(\mathbf{z}^0) - \phi_{\Delta t, H}(\mathbf{z}^0) = \mathcal{O}(\Delta t^2)$, takže řešič je alespoň prvního řádu.

Podobně lze postupovat i obecně. Platí, jestliže $H = \sum_i^k H_i$, kde H_i jsou dvakrát diferencovatelné Hamiltoniány, potom metoda, kterou nazýváme **složenou metodou**,

$$\psi_{\Delta t} = \phi_{\Delta t, k} \circ \phi_{\Delta t, H_{k-1}} \circ \cdots \circ \phi_{\Delta t, H_1},$$

je symplektický integrátor alespoň prvního řádu.

Příklad. V práci [1] je podrobně odvozena výše uvedená Euler-A metoda. Zde si ukažme, jak uvedenou metodiku použít ke získání leapfrogu. Zvolme $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$ a uvažujme dělení

$$H_1 = \frac{1}{2}V(\mathbf{q}), \quad H_2 = T(\mathbf{p}), \quad H_3 = \frac{1}{2}V(\mathbf{q}),$$

čemuž odpovídá složená metoda:

$$\psi_{\Delta t} = \phi_{\Delta t, V/2} \circ \phi_{\Delta t, T} \circ \phi_{\Delta t, V/2}.$$

⁷Tuto aproximaci obdržíme za pomoci vhodného složení symplektických (aproximací) toků náležejících H_1 , H_2 .

Pro H_1, H_3 dostáváme systémy ve tvaru

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{q} &= 0, \\ \frac{d}{dt}\mathbf{p} &= -\frac{1}{2}\nabla_q V(\mathbf{q}),\end{aligned}$$

Pro H_2 obdržíme

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{q} &= \nabla_p T(\mathbf{p}), \\ \frac{d}{dt}\mathbf{p} &= 0.\end{aligned}$$

Představme si zobrazení $\psi_{\Delta t}$ jako postupné zobrazování bodů:

$$\psi_{\Delta t} : (\mathbf{q}^n, \mathbf{p}^n) \rightarrow (\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}) \rightarrow (\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) \rightarrow (\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1}).$$

Pak pro $(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}}) = \phi_{\Delta t, V/2}(\mathbf{q}^n, \mathbf{p}^n)$ získáme

$$\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{q}} \\ \tilde{\mathbf{p}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}^n \\ \mathbf{p}^n - \frac{\Delta t}{2}\nabla_q V(\mathbf{q}^n) \end{bmatrix},$$

dále $(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) = \phi_{\Delta t, T}(\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{p}})$, takže získáváme:

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{q}} \\ \hat{\mathbf{p}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{q}} + \Delta t \nabla_p T(\tilde{\mathbf{p}}) \\ \tilde{\mathbf{p}} \end{bmatrix}.$$

Protože $(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1}) = \phi_{\Delta t, V/2}(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})$, platí:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{q}^{n+1} \\ \mathbf{p}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{q}} \\ \hat{\mathbf{p}} - \frac{\Delta t}{2}\nabla_q V(\hat{\mathbf{q}}) \end{bmatrix}.$$

Konečně, složením dostáváme předpis

$$\begin{bmatrix} \mathbf{q}^{n+1} \\ \mathbf{p}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}^n + \Delta t \nabla_p T(\mathbf{p}^n - \frac{\Delta t}{2}\nabla_q V(\mathbf{q}^n)) \\ \mathbf{p}^n - \frac{\Delta t}{2}\nabla_q V(\mathbf{q}^n) - \frac{\Delta t}{2}\nabla_q V(\mathbf{q}^{n+1}) \end{bmatrix},$$

což je již známá Störmer-Verlet metoda (1.8). Tato metoda je tudíž symplektická.

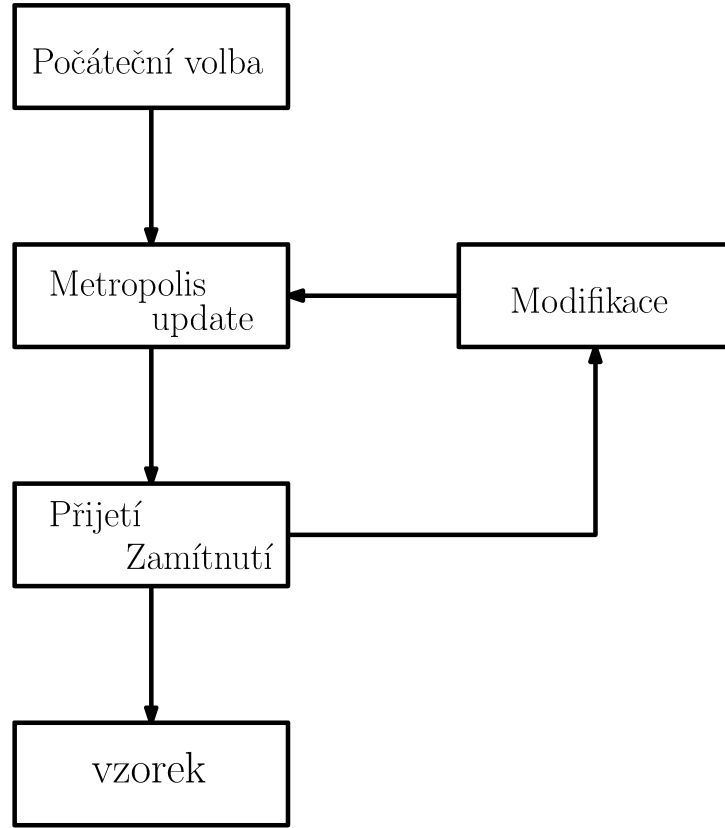
4.4. Symplektické metody vyšších řádů. Ve vědecké práci [8] uvádí, jak zefektivnit výše uvedené skládání symplektických metod. Využívají k tomu symetrického skládání, které v naší práci není uvedeno. Takto složená metoda bude řádu sudého. Symetrickým složením metody leapfrog bylo dosaženo symplektické metody čtvrtého řádu, jež je (ne příliš působným způsobem) odvozená v [9]. Metodu zde nyní uvedeme a dále s ní budeme pracovat v sekci 6.

Pro $(Q_1, P_1) = (\mathbf{q}_n, \mathbf{p}_n)$, $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ je ve tvaru:

$$\begin{aligned}P_{i+1} &= P_i - c_i \nabla_q V(Q_i) & Q_{i+1} &= Q_i + d_i \nabla T(P_{i+1}) \\ c_1 &= 0 & d_1 &= x + \frac{1}{2} \\ c_2 &= 2x + 1 & d_2 &= -x \\ c_3 &= -4x - 1 & d_3 &= -x \\ c_4 &= 2x + 1 & d_4 &= x + \frac{1}{2}\end{aligned} \tag{4.2}$$

kde $(\mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1}) = (Q_4, P_4)$. Metoda je viditelně explicitní.

5. Hamiltonovské Markov chain Monte Carlo



OBRÁZEK 5.1. Schéma MCMC.

5.1. Hamiltonovské Markov chain Monte Carlo. Algoritmy MCMC slouží ke vzorkování z vybraného pravděpodobnostního rozdělení. V první části algoritmu MCMC je návrh kandidáta možného následujícího vzorku. Tato volba je dána propozičním rozdělením. Druhá část algoritmu na základě daného kritéria rozhodne o přijetí nebo odmítnutí navrženého kandidáta. Hamiltonovské Markov chain Monte Carlo, též nazýváno Hybridní Monte Carlo, zkráceně HMC, k volbě následujícího vzorku používá hamiltonovskou mechaniku. Je tedy speciálním případem MCMC. Roli vzorků budou zastávat pozice \mathbf{q} , hybnosti \mathbf{p} mají pomocný význam.

V této a následujících dvou částech podstatným způsobem vycházíme z článku [6] (doplněném o vlastní příklady), ve kterém je výklad dané problematiky rozumným kompromisem mezi matematickou přesností a srozumitelností.

5.2. Kanonické rozdělení. Pravděpodobnostní rozdělení, ze kterého vzorkujeme, je svázáno s představou potenciální energie pomocí užití tzv. kanonického rozdělení. Toto rozdělení bývá studováno ve statistické mechanice. Podle [5] nám kanonické rozdělení udává stav systému \mathbf{x} s energií $E(\mathbf{x})$ a hustotou pravděpodobnosti

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} e^{(-E(\mathbf{x})/kT)},$$

kde k je Boltzmannova konstanta, T je absolutní termodynamická teplota systému a Z je normalizační konstanta.

K popisu stavu \mathbf{x} systému použijeme dvojici (\mathbf{q}, \mathbf{p}) , tedy polohu a hybnost. energii $E(\mathbf{x})$ pak můžeme nahradit Hamiltoniánem $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. To vede ke sdruženému rozdělení

$$f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{Z} e^{(-H(\mathbf{q}, \mathbf{p})/kT)}.$$

Ve zbytku práce budeme téměř vždy pracovat s Hamiltoniánem ve tvaru $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$, takže dostáváme

$$f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{Z} e^{(-V(\mathbf{q})/kT)} e^{(-T(\mathbf{p})/kT)}. \quad (5.1)$$

Sdružená hustota pravděpodobnosti (5.1) je tedy součinem dvou hustot pravděpodobnosti kanonického rozdělení a tudíž \mathbf{q} a \mathbf{p} jsou nezávislé. Z pohledu bayesovské statistiky je naším zájmem aposteriorní rozdělení modelových parametrů, v našem případě pozice \mathbf{q} . Zvolíme-li $kT = 1$, můžeme vyjádřit kanonickou distribuci užitím potenciální energie jako

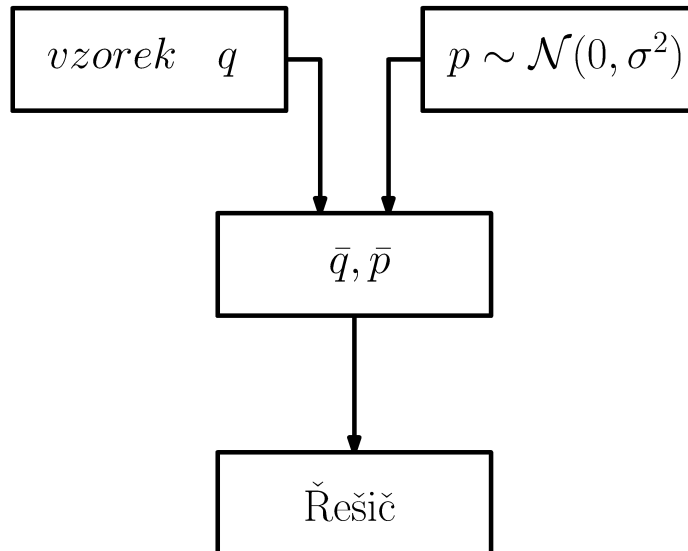
$$V(\mathbf{q}) = -\ln\left[\frac{\rho(\mathbf{q})L(b|D)}{Z_q}\right],$$

kde $\rho(\mathbf{q})$ je apriorní hustota, $L(\mathbf{q}|D)$ je věrohodnostní funkce a Z_q je normalizační konstanta. Poznamenejme, že podmínka $kT = 1$ nepředstavuje praktické omezení, protože ji lze snadno splnit vhodnou volbou jednotek měření teploty. Tuto volbu budeme předpokládat až do konce textu.

Hustota vzorkované veličiny určuje potenciální energii. Volba kinetické energie je libovolná. V nejjednodušším případě se rozdělení vektoru hybnosti \mathbf{p} volí jako normální rozdělení s nulovou střední hodnotou. Tzn. dostáváme kinetickou energii ve tvaru

$$T(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^d \frac{p_i^2}{\sigma_i^2} + \ln Z_p,$$

kde σ je vektor směrodatných odchylek a Z_p je normalizační konstanta.



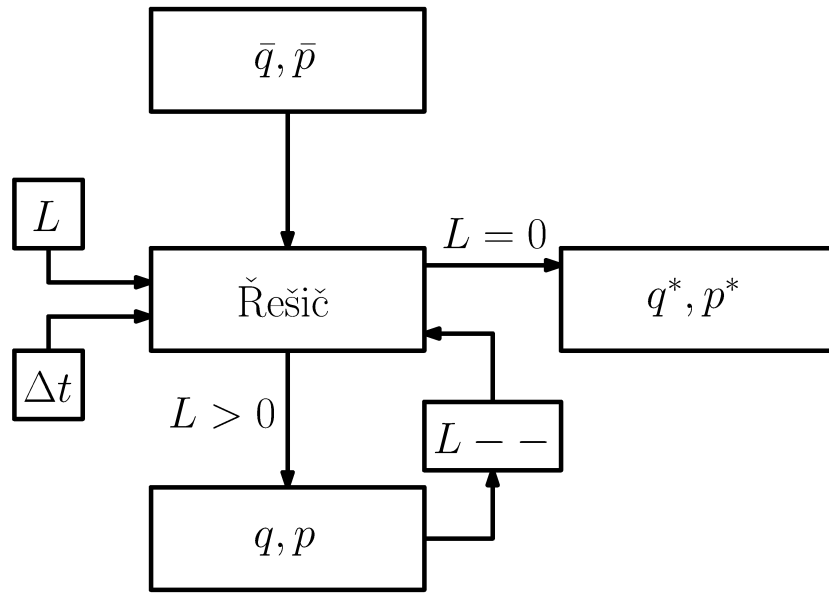
OBRÁZEK 5.2. Schéma tvorby aktuálního stavu v HMC.

5.3. Dva kroky HMC. Chování algoritmu můžeme z pravděpodobnostního hlediska popsat ve dvou krocích. Nejdříve dojde ke změně hybnosti a potom nastává možnost změny hybnosti

a pozice. Můžeme si představit, že se tím posuneme na další úroveň v Markovovém řetězci. Jak naznačíme, oba kroky zachovávají stacionaritu sdruženého kanonického rozdělení.

V prvním kroku nejdříve náhodně vybereme hybnost \mathbf{p} z normálního rozdělení se střední hodnotou $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ a kovarianční maticí $\boldsymbol{\Sigma}$, nezávisle na hodnotách pozice \mathbf{q} . Jelikož neprobíhá změna pozice a hybnost je vybrána ze správného rozdělení vzhledem k pozici, pak tento krok ponechává sdružené kanonické rozdělení stacionární.

V druhém kroku je proveden tzv. Metropolis update užitím hamiltonovské mechaniky, který navrhne nový stav. Počínaje stavem, daným aktuální polohou $\bar{\mathbf{q}}$ a modifikovanou hybností $\bar{\mathbf{p}}$, je hamiltonovská mechanika simulována vhodným integrátorem, nejčastěji užitím L kroků metody leapfrog s časovým rozmezím Δt . Zdůrazněme, že efektivita HMC závisí podstatným způsobem na správné volbě těchto parametrů.

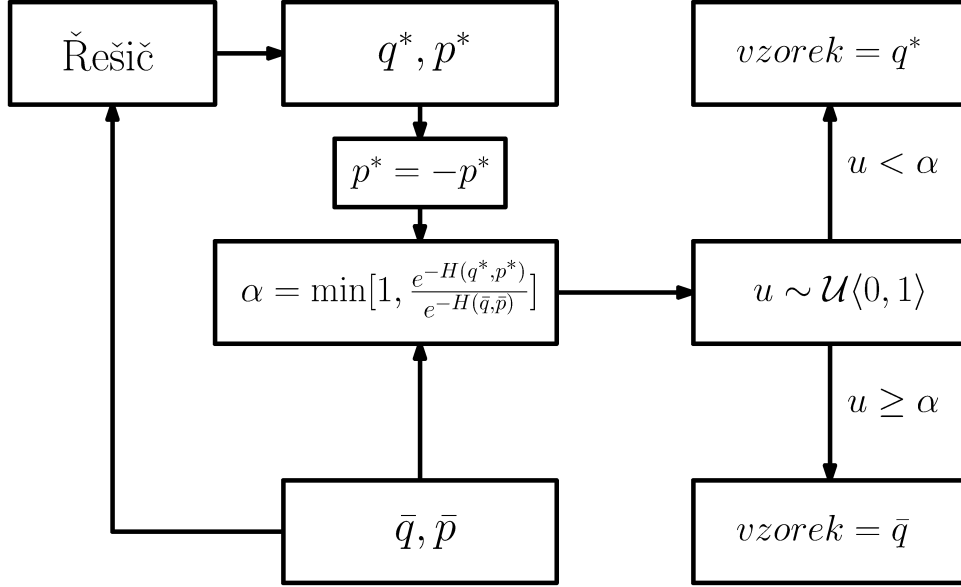


OBRÁZEK 5.3. Schéma numerického řešiče v HMC.

Po dokončení L kroků leapfrogu a negaci hybnosti, kvůli symetrii propozičního rozdělení, získáváme stav $(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)$ kandidující na přijetí. Uvedený stav může být přijat jako následující vzorek na základě kritéria přijetí ve tvaru:

$$\min\left[1, \frac{e^{-H(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)}}{e^{-H(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{p}})}}\right].$$

Pokud je stav $(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)$ zamítnut, za vzorek opět zvolíme $\bar{\mathbf{q}}$. V případě přijetí stavu $(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)$ je za vzorek zvoleno \mathbf{q}^* . Symetrie propozičního rozdělení je nutná k tomu, aby byla zmíněná pravděpodobnost přijetí korektní. V praxi tato negace není obvykle aplikována, jelikož často volíme kinetickou energii jako sudou funkci a hybnost bude v další iteraci HMC volena nezávisle na předchozí.



OBRÁZEK 5.4. Schéma přijetí, zamítnutí vzorku v HMC.

Z pohledu sdruženého rozdělení (\mathbf{q}, \mathbf{p}) Metropolis update ponechává kanonickou pravděpodobnostní hustotu pro (\mathbf{q}, \mathbf{p}) téměř nezměněnou⁸. Trajektorie řešení hamiltonovských rovnic totiž leží na vrstevnicích Hamiltoniánu. Pohyb do $(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)$ s jinou pravděpodobnostní hustotou je proveden na začátku změnou hybnosti \mathbf{p} .

5.4. Stacionarita kanonického rozdělení. Nastíňme, jak Metropolis update ponechává kanonickou distribuci pro (\mathbf{q}, \mathbf{p}) v tzv. detailní rovnováze. Nejprve rozdělme disjunktně prostor proměnných (\mathbf{q}, \mathbf{p}) do dostatečně malých oblastí A_k , $k \in \mathbb{N}$ se stejně velkým objemem \mathcal{V} . Necht' obraz A_k vzhledem k symplektickému (tedy zachovávajícímu objem) a symetrickému (časově reverzibilnímu) řešiči a následné negaci hybnosti je oblast B_k . Symetrie řešiče garantuje, že systém $\{B_k\}$ je systémem po dvou disjunktních množin. Symplekticita řešiče zajišťuje, že objem každé množiny B_k je také \mathcal{V} . Zvolme A_i a označme symbolem $P(A_i)$ pravděpodobnost, že výchozí vzorek náleží množině A_i . Tato pravděpodobnost je určena kanonickým rozdělením s hustotou $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{Z} e^{-H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}$. Zvolme ještě B_j a označme symbolem $T(B_j|A_i)$ podmíněnou pravděpodobnost, že stav $(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*) \in B_j$ je *akceptován* (\mathbf{q}^* je přijato jako vzorek) za předpokladu, že tento stav jsme získali ze stavu $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{p}}) \in A_i$ pomocí příslušného řešiče a následnou negací hybnosti. Řekneme, že kanonické rozdělení vyhovuje detailní rovnováze, jestliže pro všechna i a j platí:

$$P(A_i)T(B_j|A_i) = P(B_j)T(A_i|B_j). \quad (5.2)$$

Dokažme, že kanonické rozdělení odpovídající Hamiltoniánu vyhovuje detailní rovnováze.

Pro $i \neq j$ je pravděpodobnost přechodu z důvodu symetrie řešiče nulová a tudíž je rovnost (5.2) triviálně splněna.

Rozeberme situaci v (5.2) pro případ $i = j$. Hlavním důvodem platnosti následujících úvah je dostatečná hladkost Hamiltoniánu. Bude-li oblast A_k dostatečně malá, bude v ní možné reprezentovat Hamiltonián konstantní hodnotou, kterou označíme H_{A_k} . Proto (předpokládáme $i = j$)

⁸Změna může nastat v důsledku chyby numerické metody.

můžeme přepsat rovnost (5.2) do tvaru:

$$\frac{\mathcal{V}}{Z} e^{(-H_{A_i})} \min[1, e^{(-H_{B_i} + H_{A_i})}] = \frac{\mathcal{V}}{Z} e^{(-H_{B_i})} \min[1, e^{(-H_{A_i} + H_{B_i})}].$$

Poslední rovnost je ovšem elementárně splněna.

Splnění detailní rovnováhy pro kanonické rozdělení odpovídající Hamiltoniánu v důsledku znamená, že toto kanonické rozdělení zůstane zachováno i po aplikaci kroku Metropolis update. Zdůvodněme to podrobněji.

Nechť $R(X)$ označuje pravděpodobnost, že Metropolis update pro stav v dostatečně malé oblasti X povede k zamítnutí navrhovaného stavu. Předpokládejme, že aktuální stav $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{p}})$ odpovídající přijatému vzorku $\bar{\mathbf{q}}$ se řídí kanonickým rozdělením pravděpodobnosti. Pravděpodobnost $\mathcal{P}(B_k)$, že přijmeme \mathbf{q}^* jako vzorek navrhovaného stavu $(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)$ a že tento stav patří do dostatečně malé oblasti B_k je dána jako součet pravděpodobností, že aktuální stav $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{p}})$ leží v B_k a dojde k zamítnutí \mathbf{q}^* (klademe $(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*) = (\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{p}})$) a součtu pravděpodobností, že následující stav $(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)$ padne do B_k a \mathbf{q}^* je přijat. Stačí ukázat, že uvedená pravděpodobnost $\mathcal{P}(B_k)$ je stejná, jako pravděpodobnost $P(B_k)$, že $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{p}})$ patří do B_k . K tomu si stačí uvědomit, že platí:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(B_k) &= P(B_k)R(B_k) + \sum_i P(A_i)T(B_k|A_i) = P(B_k)R(B_k) + \sum_i P(B_k)T(A_i|B_k) \\ &= P(B_k)R(B_k) + P(B_k) \sum_i T(A_i|B_k) \\ &= P(B_k)R(B_k) + P(B_k)(1 - R(B_k)) \\ &= P(B_k). \end{aligned}$$

Ukázali jsme vlastně, že kanonické rozdělení pravděpodobnosti odpovídající zadanému Hamiltoniánu je invariantní vůči přechodu na následující úroveň Markovova řetězce, tzn. stacionaritu tohoto rozdělení (viz. str. 223, [7]).

5.5. Ergodicita HMC. Ergodicitu Markovova řetězce lze volně charakterizovat podmínkou, že je možné navštívit každý stav z každého stavu s nenulovou pravděpodobností (ne však nutně v jednom kroku). Obvykle HMC nebude omezeno jen na nějakou podmnožinu množiny stavů, a tudíž bude konvergovat k danému stacionárnímu rozdělení. Nicméně, pokud volba L kroků leapfrogu s délkou kroku Δt tvoří periodu $\Delta t \cdot L$ řešení hamiltonovského systému, pak může "ergodicita" selhat. Pro jednoduchý hamiltonián $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \mathbf{q}^2/2 + \mathbf{p}^2/2$ je perioda řešení 2π . Hodnoty $\Delta t \cdot L$, jež jsou blízké periodě řešení sice ergodicitu zanechávají, nicméně HMC značně zpomalují. Tento problém je v praxi často vyřešen náhodným výběrem hodnoty parametrů z malého intervalu.

5.6. Algoritmus HMC. Jedna iterace algoritmu HMC (Algoritmus 1 níže) funguje na základě pěti vstupních údajů. Prvním z nich je potenciální energie, jež je dána pravděpodobnostním rozdělením, ze kterého vzorkujeme. Dále jsou to gradient potenciální energie, počet kroků a délka kroků leapfrogu a aktuální hodnota pozice, tzn. hodnota posledního vzorku. Výstupem je pak následující vzorek. Před realizací první iterace HMC je nutné zvolit první vzorek. V prvních iteracích algoritmu HMC může nastat situace, kdy „cestujeme“ po \mathbf{q} s nízkou hustotou pravděpodobnosti. Pro takové vzorky se Markovův řetězec ještě neustálil ke svému limitnímu rozdělení.

Algoritmus 1 Pseudokód HMC algoritmu.

```
HMC = funkce(V, grad_V, h, L, aktualni_q)
{
  # V - potenciální energie; grad_V - gradient potenciální energie
  # h - délka kroku integrátoru; L - počet kroků integrátoru
  # aktualni_q - počáteční pozice

  q = aktualni_q
  p = vektor náhodně vybraných hodnot,  $p \sim \mathcal{N}(0, I)$ 
  aktualni_p = p

  # L kroků metody leapfrog
  pro i od 1 do L
  {
    p = p - (h/2) * (grad_V(q))
    q = q + h * p
    p = p - (h/2) * (grad_V(q))
  }

  # negace hybnosti kvůli symetrii propozičního rozdělení
  p = -p

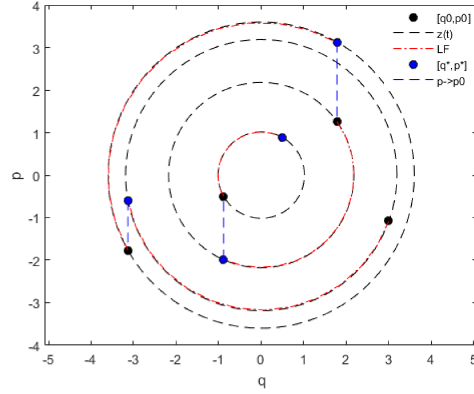
  # výpočet potenciálních a kinetických energií které vstupují do rozhodovacího kritéria
  aktualni_V = V(aktualni_q)
  aktualni_T = sum(aktualni_p^2) / 2
  navrhnete_V = V(q)
  navrhnete_T = sum(p^2) / 2

  # zamítnutí, nebo přijetí navrhnutého stavu (q,p)
  u = náhodné číslo z uniformního rozdělení na intervalu (0, 1)
  a = exp(aktualni_V - navrhnete_V + aktualni_T - navrhnete_T)

  jestli u je menší než a
    výstup q
  jinak
    výstup aktualni_q
}
```

Jako prevence se někdy aplikuje tzv. burn-in, zahoezení dostatečného počtu počátečních vzorků. Počet těchto vzorků se obvykle určuje heuristicky.

Ilustrace čtyř iterací algoritmu HMC v jedné dimenzi pro Hamiltonián $H(q, p) = q^2/2 + p^2/2$ lze vidět na obrázku 5.5. Vzhledem k sudosti předpisu pro kinetickou energii $T(p)$ byla negace hybnosti na konci L kroků leapfrogu zanedbána. Bodem $[q_0, p_0]$ je označen aktuální stav, $z(t)$ označuje řešení dané Hamiltoniánem $H(q(t), p(t)) = H(q_0, p_0)$, LF označuje transformaci L kroků leapfrogu, $[q^*, p^*]$ jsou přijaté vzorky, $p \rightarrow p_0$ označuje volbu nové hybnosti.



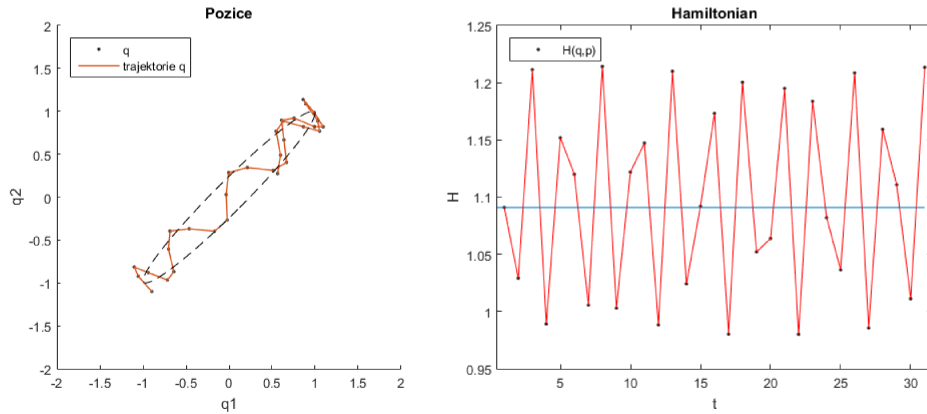
OBRÁZEK 5.5. Čtyři iterace HMC, počáteční bod: $[3, -1]$.

5.7. Aplikace HMC. V této části ilustrujeme HMC na typických pravděpodobnostních rozděleních a porovnáváme s Metropolis algoritmem s náhodnou procházkou.

Nejprve ilustrujeme HMC ve 2 dimenzích při generaci \mathbf{q} z bivariantního normálního rozdělení se středními hodnotami 0, rozptily 1 a kovariancemi 0.97. Hybnost \mathbf{p} bude generována normálním rozdělením se středními hodnotami 0 a s jednotkovou kovarianční maticí I . Hamiltonián má formu:

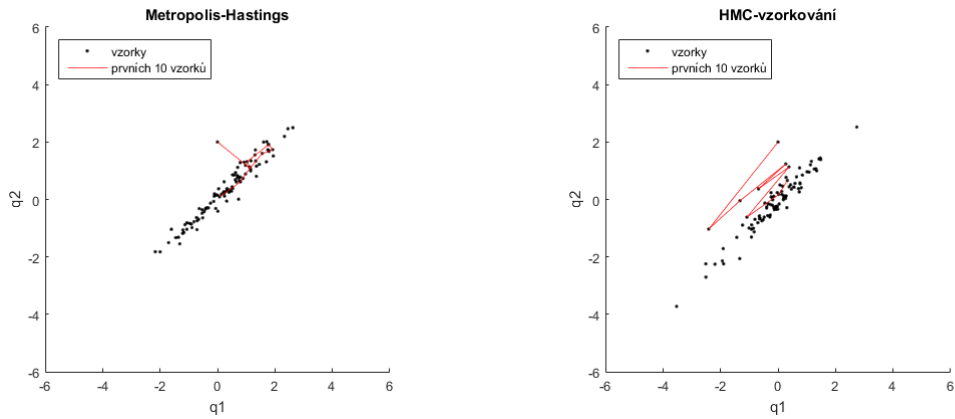
$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{q}^T \Sigma_q^{-1} \mathbf{q}}{2} + \frac{\mathbf{p}^T I \mathbf{p}}{2}, \quad \Sigma_q = \begin{bmatrix} 1 & 0.97 \\ 0.97 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.3)$$

Na obrázku 5.6 lze vidět trajektorie aproximace řešení příslušné hamiltonovské soustavy, jež navrhuje nový stav užitím třiceti kroků leapfrogu s velikostí kroku 0.2. Jelikož je (\mathbf{q}, \mathbf{p}) čtyřdimenzionální prostor, zobrazujeme pouze pozici a odpovídající hodnotu Hamiltoniánu.

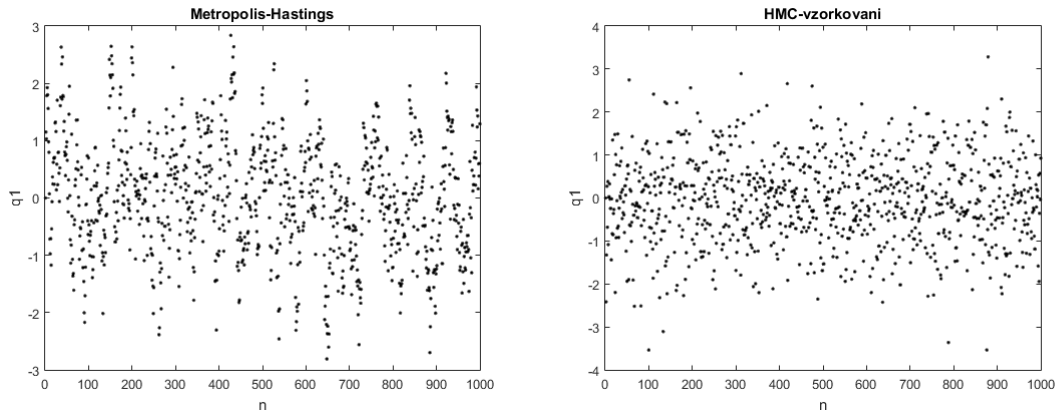


OBRÁZEK 5.6. Jedna iterace HMC pro zadání (5.3) s počátečními hodnotami $\mathbf{q} = [-0.9, -1.1]$: Vlevo trajektorie \mathbf{q} , poloosa vyznačené elipsy má hodnoty směrodatné odchylky. Vpravo jsou znázorněny odpovídající hodnoty Hamiltoniánu v krocích aplikací leapfrogu.

Trajektorie \mathbf{q} se pohybuje po rostoucí diagonále. Hodnoty pozice kolem této diagonály oscilují a způsobují tak i oscilaci Hamiltoniánu. Tyto oscilace závisí na délce kroku Δt . Volba velikosti Δt zajišťuje asymptotickou stabilitu daného řešiče. Z podkapitoly o asymptotické stabilitě známe vztah pro omezení délky kroku leapfrogu: $\Delta t \leq 2/\sqrt{\lambda_i}$, kde λ_i jsou vlastní čísla inverze kovarianční matice. Ke stabilitě metody je tedy nutné, aby $\Delta t \leq 2\sqrt{0.03} = 0.346\dots$. Pro větší hodnoty t by Hamiltonián rostl do nekonečna s časem a tudíž by klesla četnost přijetí. Taktéž by rostla oscilace hybnosti a pozice kolem diagonály. V našem případě je odchylka konečného stavu od původního stavu $+0.1224$ a tudíž pravděpodobnost přijetí je rovna $e^{-0.1224} \doteq 0.88$.



OBRÁZEK 5.7. Vzorkování (5.3) na rovině (q_1, q_2) s počáteční hodnotou $[0, 2]$: Vlevo každý 30. vzorek ze 3000 vzorků Metropolis-Hastings. Vpravo 100 vzorků HMC



OBRÁZEK 5.8. Vzorkování (5.3), vyobrazen prvek q_1 v kroku n : Vlevo každý 30. vzorek ze 30000 vzorků Metropolis-Hastings. Vpravo 1000 vzorků HMC

Na obrázcích 5.7 a 5.8 máme již vyobrazeny pouze jednotlivé vzorky. Nastavení délky a počtu kroků $\Delta t = 0.2$, $L = 30$ pro leapfrog. K porovnání je vyobrazeno i vzorkování Metropolis-Hastings (M-H) algoritmem ze stejného rozdělení. Propozičním rozdělením v M-H je zvoleno bivariate normální rozdělení se střední hodnotou rovnou aktuálnímu vzorku, směrodatnými odchylkami rovnými délce kroku v HMC. Pro Metropolis-Hastings je vzorkováno L -krát k vyrovnaní počtu iterací. Relativní četnost přijetí je pro HMC 0.913 a pro M-H 0.663. Na obrázku 5.8 si lze všimnout systému výběru M-H algoritmu, jež je dán nízkými směrodatnými odchylkami. Na druhou stranu nízké směrodatné odchylky propozičního rozdělení zvedají M-H algoritmu četnost přijetí.

5.8. Konvergence HMC algoritmu. V této části pro ilustraci uvádíme jedno z tvrzení o konvergenci HMC algoritmu, pro které je poměrně jednoduché ověřit předpoklady. Vycházíme z článku [10]. Uvažujme opět hamiltonovskou soustavu v $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{q} &= \mathbf{p}, \\ \frac{d}{dt}\mathbf{p} &= -\nabla_{\mathbf{q}}V(\mathbf{q}).\end{aligned}$$

Na potenciální energii V budeme klást následující předpoklady:

- V je dvakrát spojitě diferencovatelná funkce
- existuje $\mathcal{L} \geq 0$ takové, že $\forall \mathbf{q}, \bar{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^d$ platí:

$$\|\nabla_{\mathbf{q}}V(\mathbf{q}) - \nabla_{\mathbf{q}}V(\bar{\mathbf{q}})\| \leq \mathcal{L} \|\mathbf{q} - \bar{\mathbf{q}}\|,$$

- existuje $\beta \in \langle 0, 1 \rangle$ a existuje $M \geq 0$ takové, že $\forall \mathbf{q} \in \mathbb{R}^d$ platí (nejvýše lineární růst):

$$\|\nabla_{\mathbf{q}}V(\mathbf{q})\| \leq M(\|\mathbf{q}\|^\beta + 1).$$

Lze dokázat, že pak platí (viz. [10]): Je-li π cílová hustota pravděpodobnosti na \mathbb{R}^d , kterou chceme metodou HMC vzorkovat, tzn.

$$\pi(\mathbf{q}) = \frac{e^{-V(\mathbf{q})}}{\int_{\mathbb{R}^d} e^{-V(\mathbf{s})} d\mathbf{s}}$$

a je-li příslušná sdružená hustota dána vztahem

$$\tilde{\pi}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \propto e^{(-H(\mathbf{q}, \mathbf{p}))}, \text{ kde } H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\|\mathbf{p}\|^2}{2} + V(\mathbf{q}),$$

pak řetězec, který získáme metodou HMC (délka kroku Δt , počet kroků L) má kritérium přijetí vzorku:

$$\alpha\{(\mathbf{q}, \mathbf{p}), (\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)\} = \min\left[1, \frac{e^{-H(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)}}{e^{-H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}}\right].$$

Markovovo jádro lze pak vyjádřit⁹ ve tvaru ($\tilde{\psi}_{\Delta t}^L$ označuje projekci $\psi_{\Delta t}^L$ na souřadnice pozic)

$$P_{\Delta t, L}(\mathbf{q}, A) = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{I}_A(\tilde{\psi}_{\Delta t}^L(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{p}})) \alpha\{(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{p}}), \psi_{\Delta t}^L(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{p}})\} \frac{e^{-\frac{\|\tilde{\mathbf{p}}\|^2}{2}}}{\sqrt{(2\pi)^d}} d\tilde{\mathbf{p}} \\ + \delta_q(A) \int_{\mathbb{R}^d} (1 - \alpha\{(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{p}}), \psi_{\Delta t}^L(\mathbf{q}, \tilde{\mathbf{p}})\}) \frac{e^{-\frac{\|\tilde{\mathbf{p}}\|^2}{2}}}{\sqrt{(2\pi)^d}} d\tilde{\mathbf{p}}.$$

Označme n -násobnou kompozici symbolem $P_{\Delta t, L}^n$. Pak platí¹⁰: Pro každé $L \in \mathbb{N}$ existuje $\tau > 0$ takové, že pro každé $\Delta t \in (0, \tau)$ a všechna $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^d$:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{A \in \mathcal{B}} \left| P_{\Delta t, L}^n(\mathbf{q}, A) - \pi(A) \right| = 0, \quad (5.4)$$

kde \mathcal{B} označuje systém borelovských množin na \mathbb{R}^d .

⁹Viz. také intuitivní výklad v podsekcích 5.4, 5.5.

¹⁰V práci [10] autoři používají poněkud matoucí značení typu konvergence. Po prostudování charakteru důkazu, včetně zde uvedených odkazů, bylo rozhodnuto o interpretaci typu konvergence ve smyslu (5.4).

6. Aplikace numerických řešičů

6.1. Numerické řešení hamiltonovských rovnic experimenty.

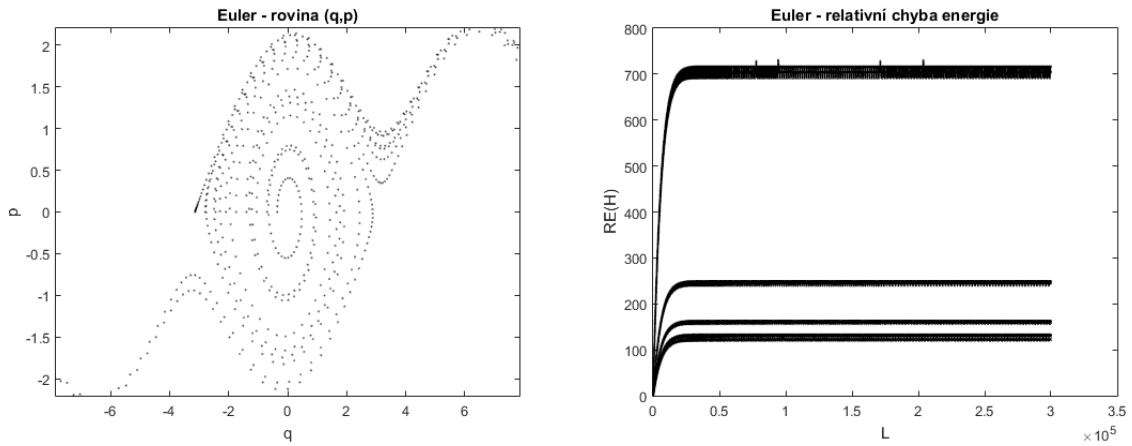
Příklad. Zobrazme aproximace řešení hamiltonovských rovnic v (q, p) rovině dané různými numerickými řešiči a relativní chybu celkové energie. Konkrétně jde o rovnice ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} q = p, \quad \frac{\partial}{\partial t} p = -\sin(q),$$

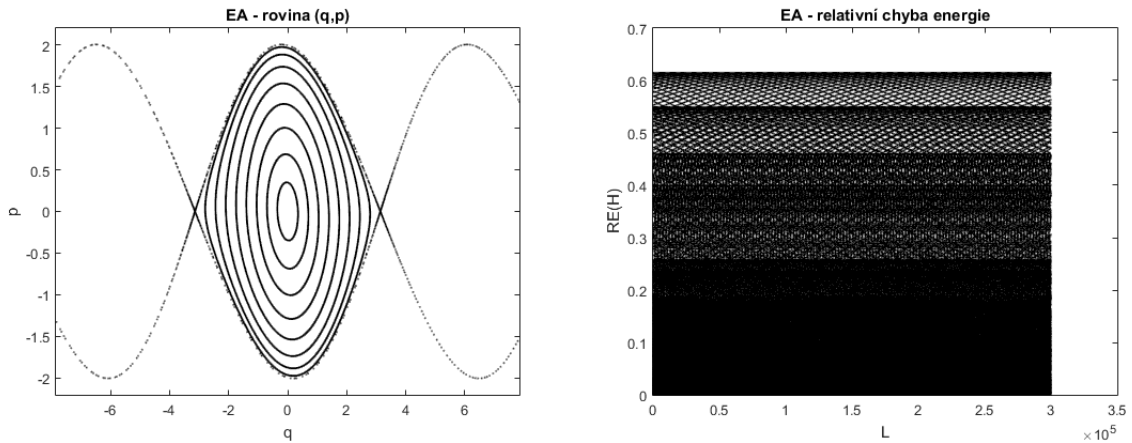
jinž náleží Hamiltonián $H(q, p) = p^2/2 - \cos(q)$. Každé dvojici obrázků přísluší jeden numerický řešič. V levém sloupci v každém grafu je zobrazena aproximace devíti řešení s počátečními hodnotami

$$p_k = 0, \quad q_k = -\pi + \frac{\pi(k-1)}{9}, \quad k = 1, 2, \dots, 9.$$

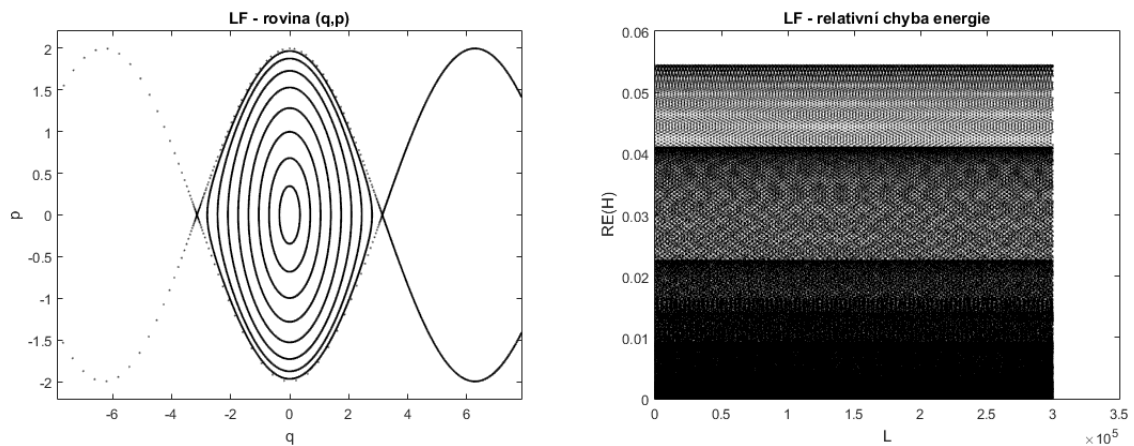
V pravém sloupci jsou pak příslušné relativní chyby Hamiltoniánu ($RE(H)$). Víme totiž, že přesná řešení leží na jeho vrstevnicích. Bylo spočteno $L = 300000$ aproximací na jednu počáteční hodnotu. Metody využívaly časového posunu $\Delta t = 0.2$. Využitými numerickými řešiči v tomto příkladě jsou: Eulerova metoda (Euler, E), Euler-A metoda (EA), metoda leapfrog (LF), 4-stupňová Runge-Kutta metoda (1.4)(RK4), symplektická metoda čtvrtého řádu (4.2)(S4).



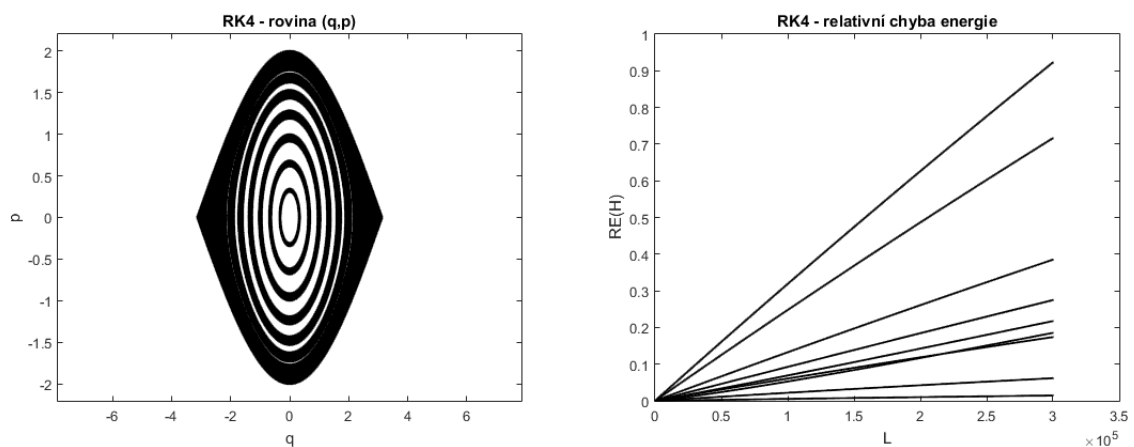
OBRÁZEK 6.1. Eulerova metoda.



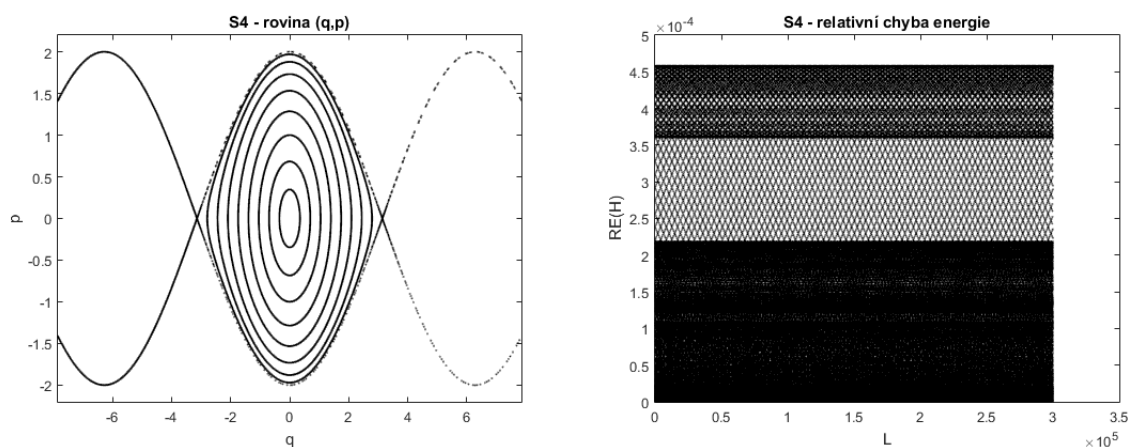
OBRÁZEK 6.2. Euler-A metoda.



OBRÁZEK 6.3. Metoda leapfrog.



OBRÁZEK 6.4. 4-stupňová Runge-Kutta metoda.



OBRÁZEK 6.5. Symplektická metoda čtvrtého řádu.

Eulerova metoda je známá svojí typickou nestabilitou a to se projevilo i v tomto případě. Růst relativní chyby Hamiltoniánu se s postupem času zpomalil, aproximace řešení se dostaly

na hladiny chyby Hamiltoniánu s minimální oscilací. Euler-A metoda je symplektická, což nám potvrzuje oscilace relativní chyby Hamiltoniánu, které jsou pro symplektické metody typické. V rovině (q, p) si lze všimnout zakřivení proti směru hodinových ručiček, jež může být přisuzováno nízké asymptotické stabilitě. Grafy relativní chyby Hamiltoniánu náležící metodě leapfrog a metodě S4 taktéž poukazují na symplekticitu. I když doba trvání metody S4 je dvojnásobná, maximální relativní chyba Hamiltoniánu je více jak stokrát menší. Toto samozřejmě přisuzujeme rozdílu řádu metod. Runge-Kutta metoda je řádu čtvrtého, nicméně není symplektická a v porovnání s metodou leapfrog řádu druhého si nevede dobře. Poukažme ještě na body $(q, p) = [-\pi + 2k\pi; 0]$, $k \in \mathbb{N}$. Řešení vedoucí těmito sedlovými body jsou symplektickými metodami simulovány správně.

metody	E	EA	LF	RK4	S4
$\max\{\text{RE}(H)\}$	730.6	0.615	0.054	0.923	$4.5 \cdot 10^{-4}$
$[t] = s$	8.8	8.5	9.6	86.5	16.9

TABULKA 1. Pro danou metodu: Maximální naměřená relativní chyba Hamiltoniánu. Na druhém řádku je uvedena doba výpočtu v sekundách.

Příklad. Porovnejme nyní symplektickou metodu leapfrog a symplektickou metodu čtvrtého řádu na systému pohybových rovnic:

$$z = (q, p), \quad \frac{d}{dt}z = J\nabla_z H(z),$$

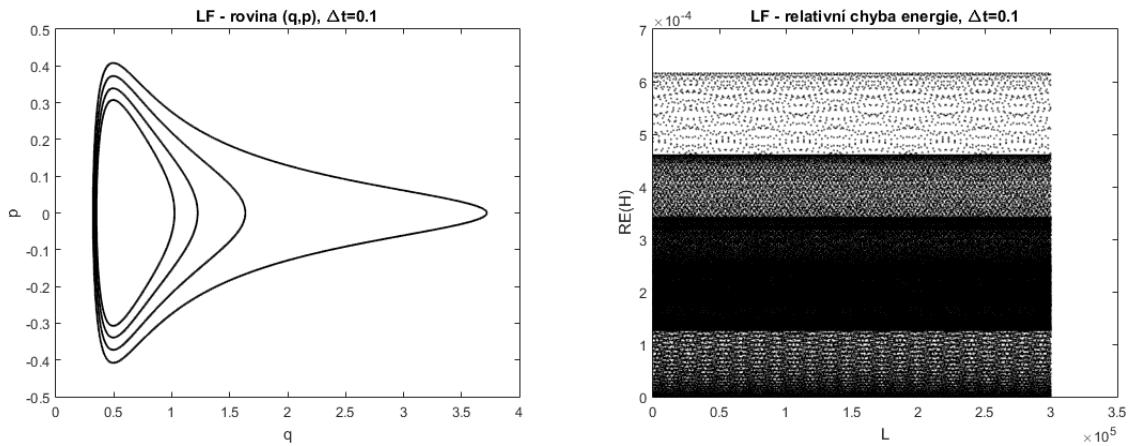
s Hamiltoniánem

$$H(q, p) = -\log\left(\frac{\sin\left(\frac{1}{q}\right)}{q} + 20\right) + \frac{p^2}{2}. \quad (6.1)$$

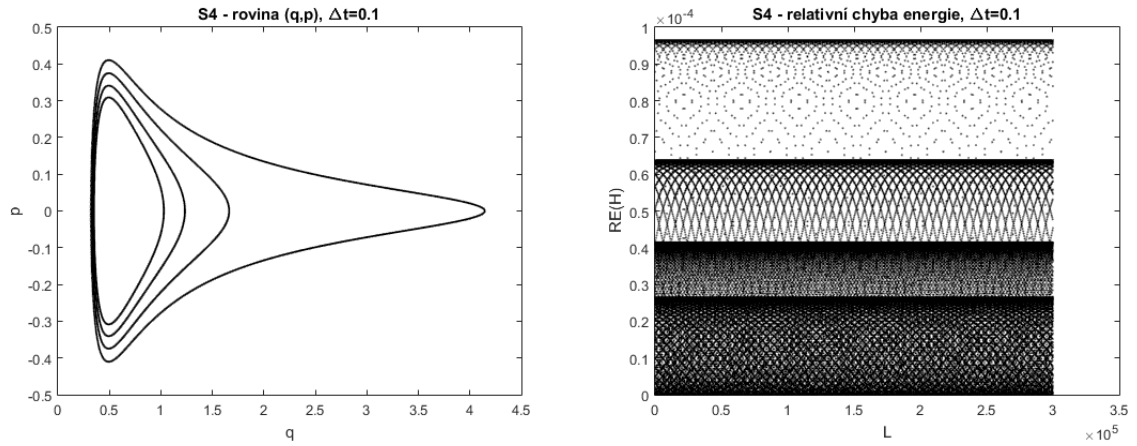
Tyto metody porovnáváme ve dvou případech časového posunu $\Delta t \in \{0.1, 0.2\}$. Opět zobrazíme aproximace čtyř řešení s počátečními hodnotami

$$p_k = 0, \quad q_k = 0.31 + 0.01k, \quad k = 1, 2, 3, 4$$

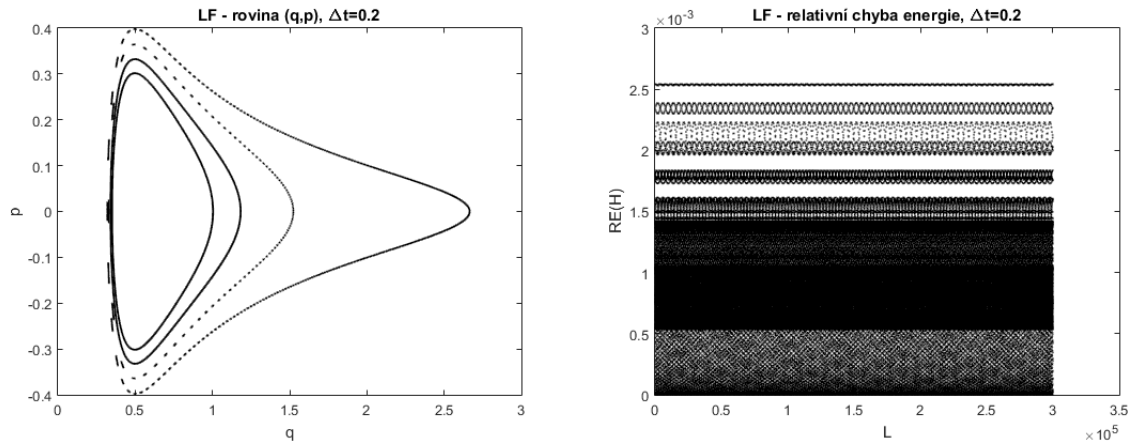
a jim příslušné relativní chyby Hamiltoniánu. Volíme $L = 300000$ na jednu počáteční hodnotu.



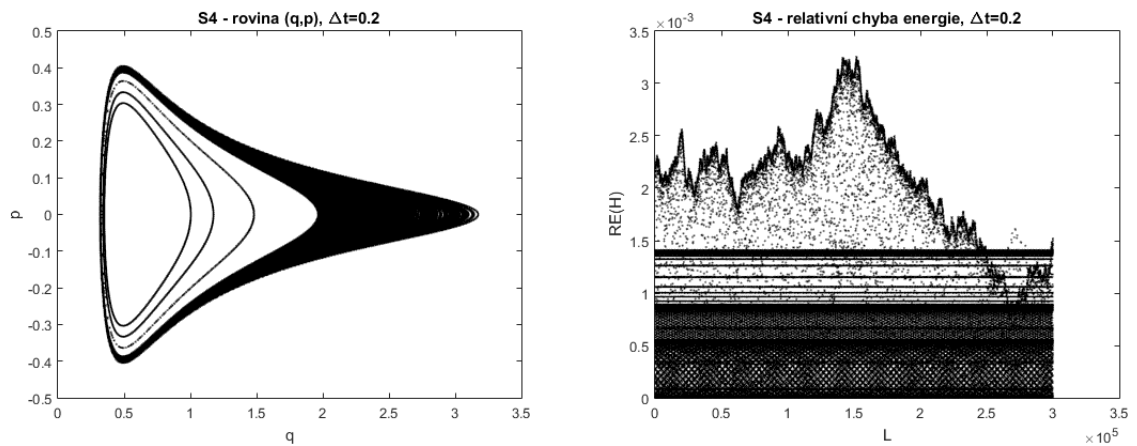
OBRÁZEK 6.6. Metoda leapfrog, $\Delta t = 0.1$.



OBRÁZEK 6.7. Symplektická metoda čtvrtého řádu, $\Delta t = 0.1$.



OBRÁZEK 6.8. Metoda leapfrog, $\Delta t = 0.2$.



OBRÁZEK 6.9. Symplektická metoda čtvrtého řádu, $\Delta t = 0.2$.

V případě $\Delta t = 0.1$ jsme dosáhli očekávaného výsledku, kdy oba grafy relativní chyby Hamiltoniánu vykazují známky symplektických metod. Rovněž jsme očekávali, že v případě S4 bude

$\text{RE}(\text{H})$ menší, jelikož je to metoda vyššího řádu, a tohoto výsledku jsme také dosáhli. V případě $\Delta t = 0.2$ pozorujeme u metody leapfrog stejné symplektické chování jako v prvním případě. U metody S4 jedna z aproximací a jí náležící $\text{RE}(\text{H})$ vykazuje zvláštní chování, které není typické pro symplektické metody. Tuto odchylku jsme začali pozorovat pro $\Delta t \geq 0.14$. S rostoucím Δt se tato odchylka vyskytuje i u následujících aproximací ($k = 1, 2, 3, 4$). Přesný důvod tohoto chování neznáme. Mohlo by se jednat o formu asymptotické nestability projevující se postupně pro různé počáteční hodnoty.

metody	LF	S4
$\max\{\text{RE}(\text{H})\}, \Delta t = 0.1$	$6.2 \cdot 10^{-4}$	$9.6 \cdot 10^{-5}$
$\max\{\text{RE}(\text{H})\}, \Delta t = 0.2$	0.025	0.033

TABULKA 2. Pro danou metodu $\Delta t \in \{0.1, 0.2\}$: Maximální naměřená relativní chyba Hamiltoniánu.

6.2. Ilustrace HMC.

Příklad. Mějme dáno pravděpodobnostní rozdělení s hustotou:

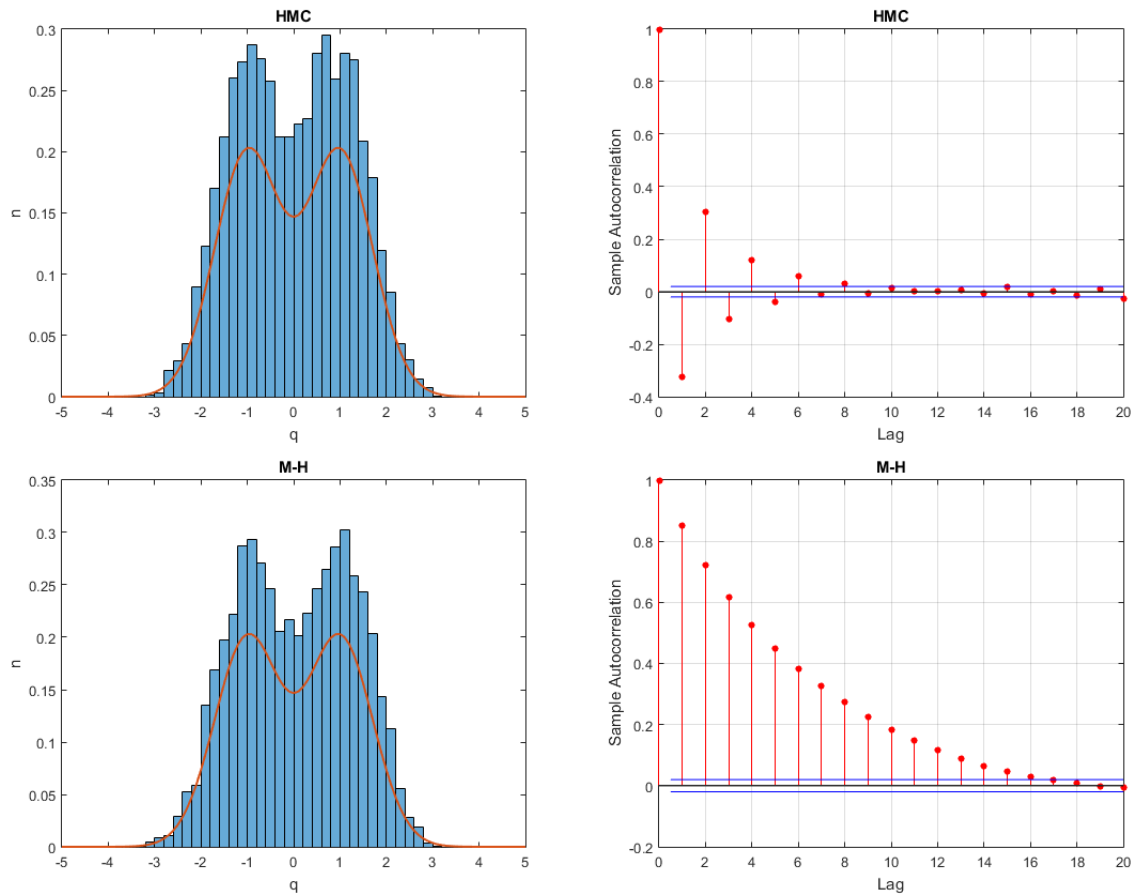
$$\pi(x) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(e^{-\frac{(x-C)^2}{2}} + e^{-\frac{(x+C)^2}{2}} \right), \quad C \in \mathbb{N}. \quad (6.2)$$

Jedná se o „součet“ dvou normálních rozdělení s rozptyly 1 a středními hodnotami $C, -C$. Střední hodnota celého rozdělení je 0. Z tohoto rozdělení vzorkujeme užitím HMC a porovnááme s Metropolis-Hastings algoritmem (M-H). V levém sloupci příslušných obrázků jsou vykresleny normované histogramy 10000 vzorků (celková plocha všech sloupců rovna 1) a k nim je vyobrazeno pravděpodobnostní rozdělení π . V pravém sloupci jsou znázorněny průměrné autokorelace vzorků s posuny $k = 1, 2, \dots, 20$:

$$a_k = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T-k} \frac{(q_t - \tilde{\mu}_q)(q_{t+k} - \tilde{\mu}_q)}{\tilde{\sigma}_q^2},$$

kde T je počet vzorků, q_t je vzorek v čase t , $\tilde{\mu}_q$ je aritmetický průměr všech vzorků a $\tilde{\sigma}_q^2$ rozptyl vzorků.

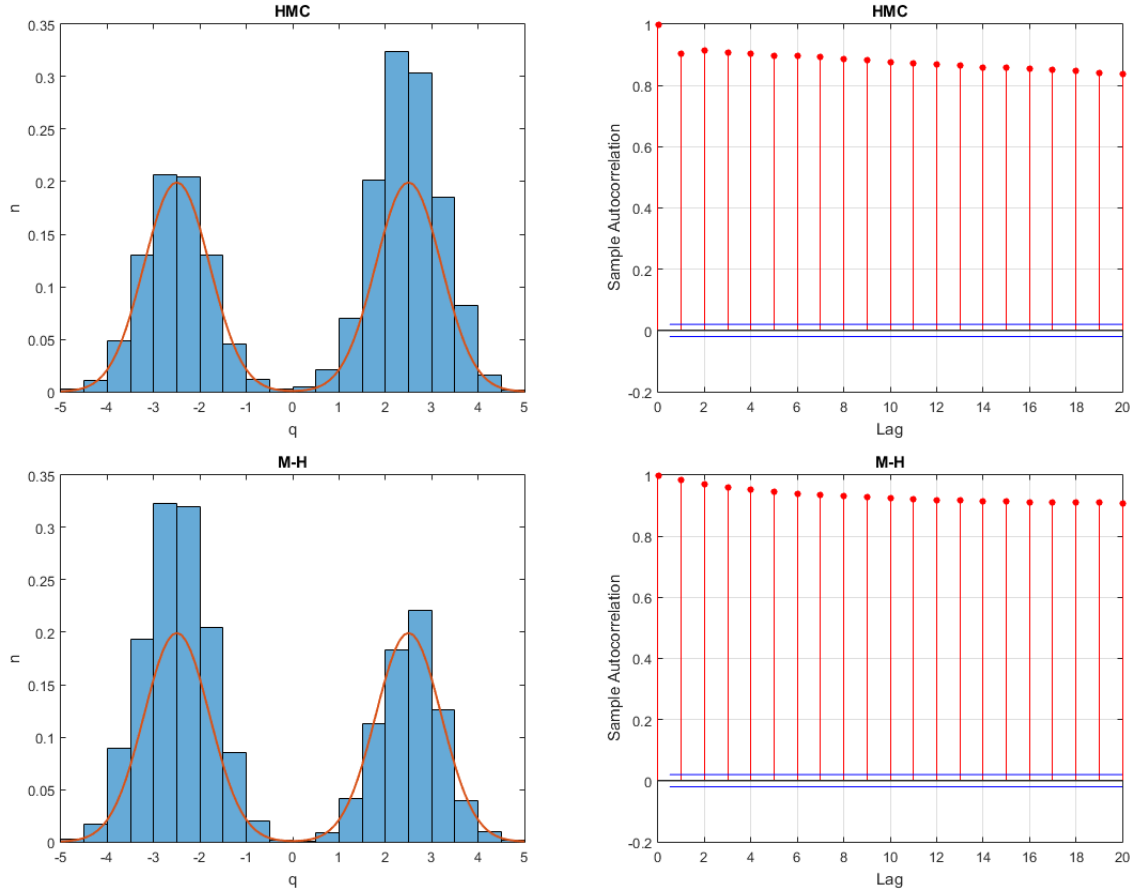
Zmíněné obrázky odpovídají následujícím volbám: $C = 1$, $q = 1$ (počáteční vzorek). Volíme nastavení HMC: metoda leapfrog, $\Delta t = 0.1$, $L = 27$, volba p je dána normálním rozdělením se střední hodnotou 0 a rozptylem 1. Propoziční rozdělení v M-H je zvoleno jako normální rozdělení se střední hodnotou v aktuálním stavu a rozptylem 0.5.



OBRÁZEK 6.10. HMC a M-H vzorkování z (6.2), $C = 1$.

U histogramů nelze rozpoznat žádné zvláštní chování. V grafech autokorelací se však projeví větší závislost vzorků v M-H algoritmu, jež je dána propozičním normálním rozdělením s nízkým rozptylem. Relativní četnost přijetí pro HMC: 0.99, MH: 0.79. Dále poznamenejme, že pro dané množství vzorků a nastavení metody leapfrog je doba trvání algoritmu HMC přibližně desetinásobná.

Následující obrázky odpovídají volbám: $C = 2.5$, $q = 1$. U HMC je změněno nastavení $L = 121$ a v M-H rozptyl propozičního rozdělení 0.2. U obou vzorkování (obrázek 6.11) se projevila volba C v rozdělení (6.2) vysokou autokorelací vzorků. Vzdálenost středních hodnot normálních rozdělení, ze kterého je vzorkované rozdělení složeno, neumožňuje často „přecházet“ mezi částmi s větší pravděpodobnostní hustotou. V těchto případech bychom doporučili další úpravu nastavení vstupních parametrů.



OBRÁZEK 6.11. HMC a M-H vzorkování z (6.2), $C = 2.5$.

Příklad. Uvažujme pravděpodobnostní rozdělení s danou hustotou pravděpodobnosti v $D = 100$ dimenzích:

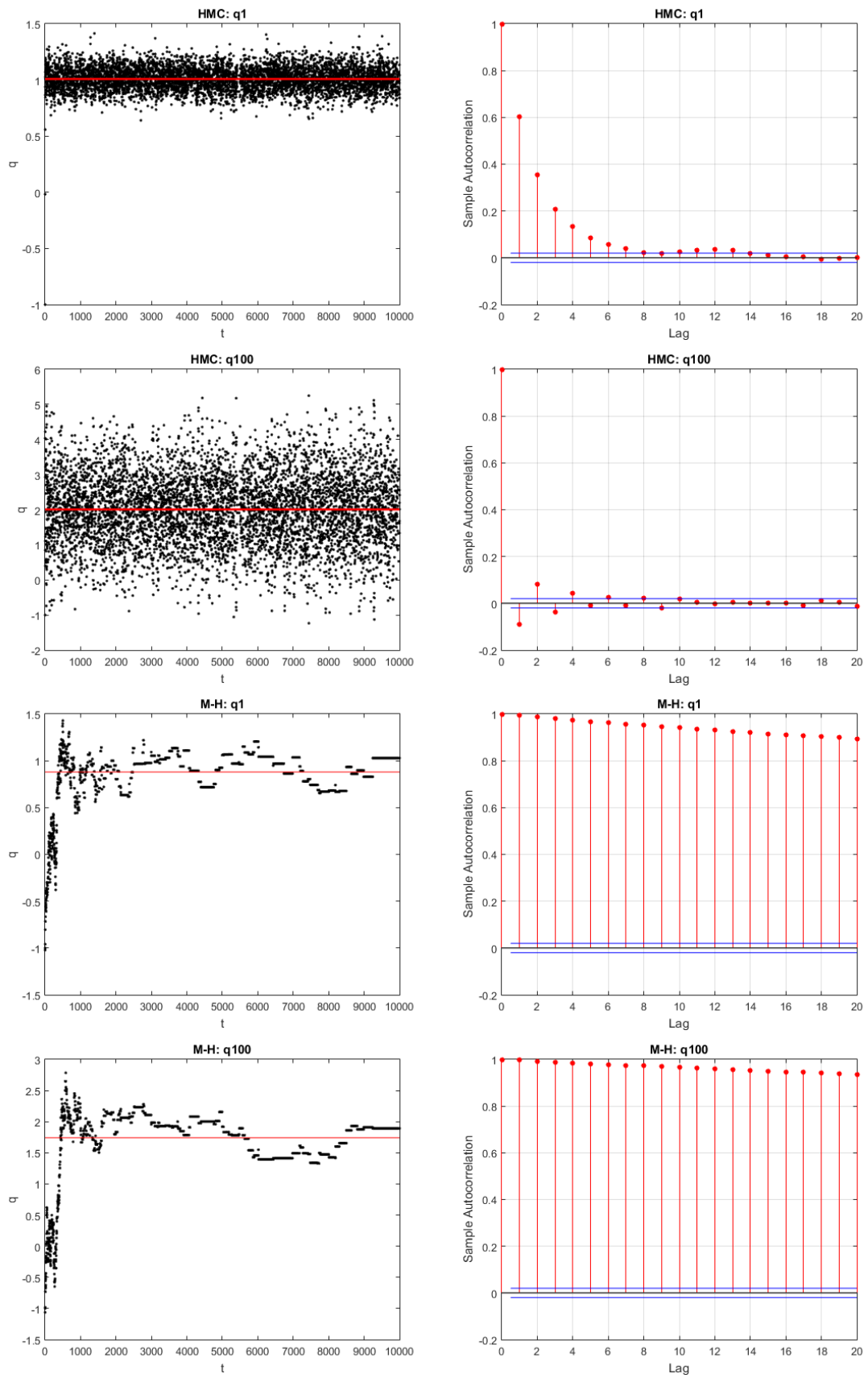
$$\pi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k \det \Sigma}} \left(e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^T \Sigma (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})} \right), \quad (6.3)$$

s diagonální kovarianční maticí Σ s rozptyly σ_i^2 a s vektorem středních hodnot $\boldsymbol{\mu}$. Tyto parametry jsou zvoleny takto:

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{(D-i+1)}, \quad \mu_i = \frac{D+i}{D}.$$

Volíme počáteční vzorek $\mathbf{q} = (-1, -1, \dots, -1)$ a nastavení HMC: metoda leapfrog, $\Delta t = 0.1$, $L = 25$, volba p je dána multivariantním normálním rozdělením s nulovým vektorem středních hodnot a jednotkovou kovarianční maticí. Propoziční rozdělení v M-H je zvoleno jako normální rozdělení se střední hodnotou v aktuálním stavu a s $\Sigma = 0.01 \cdot I$, kde I je jednotková matice.

V levém sloupci zobrazujeme generované q_1 a q_{100} odpovídající prvním a posledním souřadnicím ve vzorcích \mathbf{q} . Pravý sloupec obsahuje příslušné autokorelace vzorků.



OBRÁZEK 6.12. HMC a M-H vzorkování z (6.3).

Relativní četnosti přijetí činily 0.045 pro M-H a 0.597 pro HMC. Nízkého přijetí M-H si lze všimnout na grafech, kdy zamítání tvoří úsečky rovnoběžné s osou t . Při vykreslování jsme nevyužili metody burn-in a zatímco HMC trval přechod do vyšších pravděpodobností v případě q_1 3 kroky, pro M-H přechod převýšil 500 kroků. Při výpočtu přijímacího kritéria je v případě Metropolis-Hastings nutno využít vztahu $e^A/e^B = e^{A-B}$ a vzorkovat z rozdělení $\ln(\pi(x))$. Doba trvání algoritmu pro HMC byla přibližně desetkrát větší než u M-H.

Příklad. Uvedeme výsledky numerických výpočtů integrálu

$$\frac{1}{C} \int_a^b \frac{1}{x} \left(\frac{\sin(\frac{1}{x})}{x} + 20 \right) dx, \quad (6.4)$$

kde

$$C = \int_a^b \left(\frac{\sin(\frac{1}{x})}{x} + 20 \right) dx.$$

Integrál spočteme numericky na intervalech $\langle a, b \rangle = \langle 1, 4 \rangle, \langle \frac{1}{7}, \frac{4}{7} \rangle, \langle \frac{1}{49}, \frac{4}{7} \rangle$ algoritmy HMC a M-H. Využijeme vztahu

$$E[h(X_i)] = \int_a^b h(x) \pi(x) dx \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(X_i),$$

kde X_i označují vzorky q_i , $h(x) = \frac{1}{x}$, $\pi(x) = \left(\frac{\sin(\frac{1}{x})}{x} + 20 \right) / C$ a N označuje počet vzorků. Výsledky porovnáváme s výpočty užitím výpočetního softwaru Maple. Nastavení vstupních hodnot uvádíme v popisku tabulek. Zmíníme jen, že u M-H měníme pouze rozptyl propozičního normálního rozdělení σ_{pr}^2 se střední hodnotou v aktuálním stavu. Symbolem r_a označujeme relativní četnost přijetí. Hodnotu numerického řešení integrálů označujeme v tabulce stručně symbolem f .

HMC	LF, $L = 33$	LF, $L = 39$	S4, $L = 33$	S4, $L = 39$	M-H	Maple
r_a	0.9024	0.8945	0.9028	0.8940	0.7287	- -
f_1^4	0.4606	0.4606	0.4598	0.4606	0.4625	0.4639

TABULKA 3. Integrál (6.4) na intervalu $\langle 1, 4 \rangle$. Počet vzorků: 50 000 a počáteční vzorek $q_0 = 2$. Nastavení HMC: $\Delta t = 0.01$, $L =$ (viz. tabulka), $p \sim \mathcal{N}(0, 1)$. Nastavení M-H: $\sigma_{pr}^2 = 1$.

HMC	LF, $L = 33$	LF, $L = 39$	S4, $L = 33$	S4, $L = 39$	M-H	Maple
r_a	0.5474	0.5260	0.5357	0.5260	0.7839	- -
$f_{\frac{1}{7}}^{\frac{4}{7}}$	3.1090	3.1245	3.1185	3.1149	3.1211	3.1346

TABULKA 4. Integrál (6.4) na intervalu $\langle \frac{1}{7}, \frac{4}{7} \rangle$. Počet vzorků: 50 000 a počáteční vzorek $q_0 = \frac{1}{2}$. Nastavení HMC: $\Delta t = 0.01$, $L =$ (viz. tabulka), $p \sim \mathcal{N}(0, 1)$. Nastavení M-H: $\sigma_{pr}^2 = \frac{1}{100}$.

HMC	LF, $L = 33$	LF, $L = 39$	S4, $L = 33$	S4, $L = 39$	M-H	Maple
r_a	0.7646	0.7752	0.7569	0.6973	0.8160	- -
$\int_{\frac{1}{49}}^{\frac{4}{7}}$	6.3131	5.4086	5.1837	5.9993	5.9107	5.9570

TABULKA 5. Integrál (6.4) na intervalu $\langle \frac{1}{49}, \frac{4}{7} \rangle$. Počet vzorků: 50 000 a počáteční vzorek $q_0 = \frac{1}{2}$. Nastavení HMC: $\Delta t = 0.01$, $L =$ (viz. tabulka), $p \sim \mathcal{N}(0, 2)$. Nastavení M-H: $\sigma_{pr}^2 = 5 \cdot 10^{-3}$.

Při realizaci výpočtů užitím HMC jsme využili dvě volby L pro potvrzení, že námi přibližný výsledek nebyl pouze důsledkem náhody. Na intervalech $\langle 1, 4 \rangle$ a $\langle \frac{1}{7}, \frac{4}{7} \rangle$ jsou si výsledné hodnoty aproximace integrálů blízké. Na intervalu $\langle \frac{1}{49}, \frac{4}{7} \rangle$ tomu již tak není. Zvětšená odchylka pro HMC od výsledku v Maple (tuto hodnotu nám udal i výpočetní software Wolfram|Alpha) na tomto intervalu bude pravděpodobně způsobena volbou $\pi(x)$, které silně osciluje pro x blízká nule. Je možné, že jiná nastavení tuto odchylku zmenšují. V tomto případě doporučujeme spíše využití M-H metody, pro kterou vhodná změna rozptylu udává stabilnější výsledky.

Příklad. Spočtěme integrál

$$int = \int_{-3}^4 \cdots \int_{-3}^4 \cos(\mathbf{x}) \cdot e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})} d\mathbf{x} \quad (6.5)$$

kde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_6)$, $d\mathbf{x} = (dx_1, \dots, dx_6)$, $\boldsymbol{\mu} = (2, -2, 2, -2, 2, -2)$. K porovnání uvádíme numerické řešení dané metodou `_cuhre` v software Maple, $int = 0.155684$. U M-H opět měníme pouze diagonální kovarianční matici propozičního multivariantního normálního rozdělení, kde na diagonále volíme konstantní σ_{pr}^2 . U HMC jsou voleny různé hodnoty L , multivariantní normální rozdělení hybnosti je dáno kovarianční maticí $M = m \cdot I$.

HMC	$L = 3, m = 0.2$	$L = 3, m = 0.4$	$L = 6, m = 0.6$
r_a	0.5134	0.7224	0.6605
int	0.1527	0.1455	0.1498

M-H	$\sigma_{pr}^2 = \frac{1}{50}$	$\sigma_{pr}^2 = \frac{1}{100}$	$\sigma_{pr}^2 = \frac{1}{200}$
r_a	0.8305	0.8783	0.9138
int	0.1569	0.1596	0.1503

TABULKA 6. Integrál (6.5) na intervalu $\langle -3, 4 \rangle$. Počet vzorků: 50 000 a počáteční vzorek $q_0 = \frac{1}{2}$. Jednotné nastavení HMC: $\Delta t = 0.1$.

Doba trvání algoritmu HMC byla i pro malá L přibližně pětikrát větší než u M-H.

Závěr

Původní výsledky práce jsou prezentovány v šesté části nazvané „Aplikace numerických řešičů“. Jako nejzajímavější se jeví závislost relativní odchylky Hamiltoniánu na použité metodě a volbě délky kroku. Ukazuje se, že metoda leapfrog přináší lepší výsledky než numerický řešič Euler-A, použití metody S4 se v případě (6.9) ukazuje jako problematické, v ostatních případech ovšem vykazuje lepší výsledky než leapfrog. Různé vlastnosti aproximací řešení jsou ilustrovány na vytvořených obrázcích, za zmínku stojí zejména (6.9),(6.12).

LITERATURA

- [1] LEIMKUHLER, B. a Sebastian. REICH. Simulating Hamiltonian dynamics. New York: Cambridge University Press, 2004. ISBN 0521772907.
- [2] ATHREYA, Krishna B., Hani DOSS a Jayaram SETHURAMAN. ON THE CONVERGENCE OF THE MARKOV CHAIN SIMULATION METHOD. The Annals of Statistics [online]. s. 69-100. Dostupné z: https://projecteuclid.org/download/pdf_1/euclid.aos/1033066200
- [3] HÄGGSTRÖM, Olle. Finite Markov chains and algorithmic applications [online]. New York: Cambridge University Press, 2002. London Mathematical Society student texts, 52. ISBN 05-218-9001-2. Dostupné také z: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.24.9739&rep=rep1&type=pdf>
- [4] BESKOS, Alexandros, Natesh S. PILLAI, Jesus M. SANZ-SERNA a Andrew M. STUART. Optimal tuning of the Hybrid Monte-Carlo Algorithm [online]. 2010 [cit. 2018-04-20]. Dostupné z: <https://arxiv.org/pdf/1001.4460v1.pdf>
- [5] NEZBEDA, Ivo a Dušan NOVOTNÝ. Elementární úvod do statistické fyziky: učební text pro bakalářské studium přírodovědných oborů. Ústí nad Labem: Univerzita J.E. Purkyně v Ústí nad Labem, 2013. ISBN 978-80-7414-527-8.
- [6] NEAL, Radford M. MCMC Using Hamiltonian Dynamics. Handbook for Markov chain Monte Carlo. Boca Raton, 2011, s. 113-162. ISBN 9781420079418.
- [7] CHRISTIAN P. ROBERT a George CASELLA. Monte Carlo Statistical Methods. Second edition. New York, NY: Springer New York, 2004. ISBN 9781475741452.
- [8] YOSHIDA, Haruo. Construction of higher order symplectic integrators. In: Physics letters A. Vol 150, number 5,6,7. Tokyo 181, Japan, 1990, s. 262-268. ISSN 0375-9601.
- [9] FOREST, Etienne a Ronald D. RUTH. Fourth-Order Symplectic Integration [online]. California, 1989 [cit. 2018-04-29]. Dostupné z: <https://escholarship.org/uc/item/35h9v2k9>
- [10] DURMUS, Alain, Eric MOULINES a Eero SAKSMAN. On the convergence of Hamiltonian Monte Carlo [online]. [cit. 2018-04-29]. Dostupné z: <https://arxiv.org/pdf/1705.00166.pdf>
- [11] MEYN S. and TWEEDIE R. Markov Chains and Stochastic Stability, Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2nd edition, 2009.
- [12] TIERNEY L. Markov chains for exploring posterior distributions (with discussion). Ann. Statist. , 22(4):1701–1762, 1994.
- [13] STUCHI, T. J. Symplectic Integrators Revisited [online]. Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brazil, 2002 [cit. 2018-04-30]. ISSN 1678-4448. Dostupné z: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-97332002000500022#fig07
- [14] HAIRER, Ernst, Christian LUBICH a Gerhard WANNER. Geometric numerical integration structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. 2nd ed. Berlin [etc.]: Springer, 2006. ISBN 9783540306665.
- [15] STANSBURY, Dustin. MCMC: Hamiltonian Monte Carlo (a.k.a. Hybrid Monte Carlo) [online]. [cit. 2018-04-30]. Dostupné z: <https://theclevermachine.wordpress.com/2012/11/18/mcmc-hamiltonian-monte-carlo-a-k-a-hybrid-monte-carlo/>

PŘÍLOHA A

CD-ROM se softwarem.